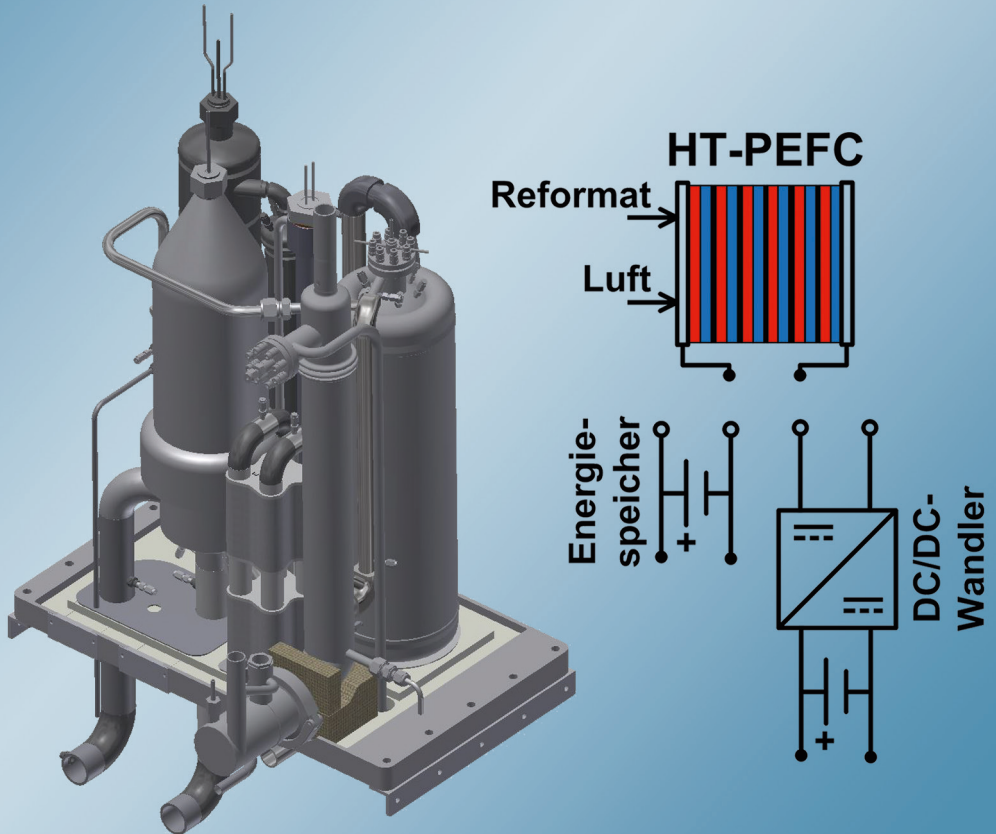


# Computerunterstützte Auslegung eines Brennstoffzellen-Batterie-Hybridsystems für die Bordstromversorgung

Carsten Krupp



Energie & Umwelt /  
Energy & Environment  
Band/ Volume 309  
ISBN 978-3-95806-124-8







Forschungszentrum Jülich GmbH  
Institut für Energie- und Klimaforschung  
Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-3)

# **Computerunterstützte Auslegung eines Brennstoffzellen-Batterie-Hybridsystems für die Bordstromversorgung**

Carsten Krupp

Schriften des Forschungszentrums Jülich  
Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment

Band / Volume 309

---

ISSN 1866-1793

ISBN 978-3-95806-124-8

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek.  
Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der  
Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte Bibliografische Daten  
sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Herausgeber  
und Vertrieb: Forschungszentrum Jülich GmbH  
Zentralbibliothek, Verlag  
52425 Jülich  
Tel.: +49 2461 61-5368  
Fax: +49 2461 61-6103  
E-Mail: [zb-publikation@fz-juelich.de](mailto:zb-publikation@fz-juelich.de)  
[www.fz-juelich.de/zb](http://www.fz-juelich.de/zb)

Umschlaggestaltung: Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich GmbH

Druck: Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich GmbH

Copyright: Forschungszentrum Jülich 2016

Schriften des Forschungszentrums Jülich  
Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment, Band / Volume 309

D 82 (Diss. RWTH Aachen University, 2015)

ISSN 1866-1793

ISBN 978-3-95806-124-8

Vollständig frei verfügbar über das Publikationsportal des Forschungszentrums Jülich (JuSER)  
unter [www.fz-juelich.de/zb/openaccess](http://www.fz-juelich.de/zb/openaccess).

Alle Rechte vorbehalten. Kein Teil des Werkes darf in irgendeiner Form (Druck, Fotokopie oder  
in einem anderen Verfahren) ohne schriftliche Genehmigung des Verlages reproduziert oder  
unter Verwendung elektronischer Systeme verarbeitet, vervielfältigt oder verbreitet werden.

# Computer-aided Design of Fuel Cell/Battery Hybrid Systems for Auxiliary Power Units

## Abstract

This thesis is concerned with developing a methodology for the further development of a fuel cell system for mobile applications. This methodology was subsequently applied to an existing fuel cell system which is based on a high-temperature polymer electrolyte fuel cell (HT-PEFC) and fuel processing through diesel reforming. The methodology focused on three topics: starting up the system, hybridizing the system, and packaging the fuel processing system. A compact and flow-optimized system design is crucial for packaging.

In the methodological approach, calculation methods with various levels of detail were combined with experimental studies. A model for the dynamic simulation of the fuel processing system was compiled to permit a coupled consideration of the issues of start-up and hybridization. In order to optimize the start-up process through spatially resolved fluid dynamic simulations, various models for porous bodies were examined and experimentally validated using transient simulations. The start-up process of the package was optimized by utilizing the validated model and an enhancement of the two-dimensional package model. For the three-dimensional optimization of the packages, an optimized meshing methodology was developed to reduce the computation time of the simulations.

The overarching objective of developing a holistic methodology for optimizing the system was accomplished in this thesis. The methodology was applied to the further development of a fuel cell system which uses diesel reforming. In addition to the development of the methodology, this approach resulted in further key insights. By pre-heating the reformer through steam and air, the two-dimensional simulations reduced the pre-heating time from 22 minutes to 9.5 minutes. By taking the pipework into consideration in package 6, however, the pre-heating time increased to 30 minutes in the three-dimensional simulation. This shows that the components must be optimized three-dimensionally. For the enhancement to a hybrid system, an active hybrid circuit was used to adapt the power output of the fuel cell and in order to react to varying power demand profiles. In cases where the fuel cell can be heated with waste heat from the application, the efficiency of the hybrid system for the power demand profile increases from 25.3 % to 28.1 %. Starting the reformer electrically by an integrated heating element was demonstrated successfully. The process of pre-heating and supplying steam with the integrated heating element alone was concluded within 30 minutes.

This methodology is a starting point for future developments of compact and efficient systems.



# Computerunterstützte Auslegung eines Brennstoffzellen-Batterie-Hybridsystems für die Bordstromversorgung

## Kurzfassung

In dieser Arbeit wurde eine Methodik zur Weiterentwicklung eines Brennstoffzellensystems für eine mobile Anwendung erarbeitet. Diese Methodik wurde anschließend auf ein bestehendes Brennstoffzellensystem, basierend auf einer Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzelle (HT-PEFC) und der Brenngaserzeugung durch Dieselreformierung, angewendet. Der Schwerpunkt der Methodik lag auf den drei Themengebieten Startvorgang des Systems, Hybridisierung des Systems und Packaging des Brenngaserzeugungssystems. Beim Packaging steht die kompakte und strömungsoptimierte Bauform des Systems im Mittelpunkt.

Als methodischer Ansatz wurden Berechnungsmethoden mit unterschiedlichem Detaillierungsgrad mit experimentellen Untersuchungen verknüpft. Es wurde ein Modell zur dynamischen Simulation des Brenngaserzeugungssystems erstellt, welches eine gekoppelte Betrachtung der Themen Startvorgang und Hybridisierung ermöglicht. Um den Startvorgang durch orts aufgelöste strömungsdynamische Simulationen optimieren zu können, wurden verschiedene Modelle für poröse Körper in transienten Simulationen untersucht und experimentell validiert. Durch die Erweiterung dieses Modells zum zweidimensionalen Packagemodell wurde der Startvorgang des Packages optimiert. Für die dreidimensionale Optimierung der Packages wurde eine optimierte Vernetzungsmethodik erarbeitet, um die Rechenzeit der Simulationen zu verringern.

In dieser Arbeit wurde das übergeordnete Ziel der Entwicklung einer Methodik zur gesamtsystemischen Optimierung des Systems erreicht. Die entwickelte Methodik wurde auf ein Brennstoffzellensystem mit Dieselreformierung angewandt. Durch diese Vorgehensweise wurden, neben der Entwicklung der Methodik, weitere wesentliche Erkenntnisse erzielt. Die parallele Aufheizung durch den Dampf- und den Luftweg verkürzte in zweidimensionalen Simulationen die Aufheizzeit von 22 Minuten auf 9,5 Minuten. Durch die Berücksichtigung der Verrohrung steigt die Aufheizzeit in der dreidimensionalen Simulation jedoch auf 30 Minuten an. Dies zeigt, dass die Komponenten dreidimensional optimiert werden müssen. Für eine Erweiterung zum Hybridsystem wurde die aktive Hybridverschaltung ausgewählt, um die Leistung der Brennstoffzelle anpassen und auf wechselnde Leistungsbedarfsprofile reagieren zu können. Für den Fall, dass die Brennstoffzelle durch Abwärme der Anwendung aufgeheizt werden kann, steigt der Wirkungsgrad des Hybridsystems für das verwendete Leistungsbedarfsprofil von 25,3 % auf 28,1 % an. Ein elektrischer Startvorgang des Reformers durch ein integriertes Heizelement wurde erfolgreich demonstriert. Der Aufheizvorgang und die Bereitstellung von Wasserdampf konnten, alleine mit dem integrierten Heizelement, innerhalb von 30 Minuten abgeschlossen werden.

Die entwickelte Methodik bildet den Ausgangspunkt für zukünftige Entwicklungen von kompakten und effizienten Systemen.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung und Zielsetzung</b>	<b>1</b>
1.1	Motivation . . . . .	2
1.2	Zielsetzung . . . . .	3
1.3	Methodik . . . . .	4
1.4	Gliederung der Arbeit . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>7</b>
2.1	Brennstoffzellenhybridsysteme . . . . .	7
2.2	Brennstoffzellen . . . . .	10
2.3	Brenngaserzeugung für Brennstoffzellen . . . . .	13
2.4	Energiespeicher . . . . .	16
2.4.1	Kennwerte von Energiespeichern . . . . .	16
2.4.2	Batterietypen . . . . .	17
2.4.3	Einordnung der Batterien . . . . .	19
<b>3</b>	<b>Stand der Technik und Forschung</b>	<b>21</b>
3.1	Reaktor- und Systementwicklung am IEK-3 . . . . .	21
3.1.1	Reaktorentwicklung . . . . .	21
3.1.1.1	Strömungsdynamische Modellierung . . . . .	23
3.1.2	Systementwicklung . . . . .	25
3.1.2.1	Startstrategie . . . . .	26
3.1.2.2	Brenngaserzeugungspackages . . . . .	28
3.2	Hybridsysteme mit Brennstoffzellen . . . . .	31
3.2.1	Verschaltungsarten . . . . .	31
3.2.1.1	Passive Hybridsysteme . . . . .	31
3.2.1.2	Aktive Hybridsysteme . . . . .	34
3.2.2	Betriebsstrategien . . . . .	35
3.3	Anfahrstrategien für Brennstoffzellensysteme . . . . .	39
3.4	Packaging von Brenngaserzeugungssystemen . . . . .	42
3.5	Ableitung der Arbeitsschwerpunkte . . . . .	49
<b>4</b>	<b>Methodik der Arbeit</b>	<b>51</b>
4.1	Methodik strömungsdynamischer Simulationen (CFD) . . . . .	54
4.1.1	Erhaltungsgleichungen der Strömungsdynamik . . . . .	54
4.1.2	Bilanzierung der Erhaltungsgleichungen . . . . .	55
4.1.3	Erzeugung eines Rechengitters . . . . .	57



4.1.4	Physikalische Modellgrundlagen . . . . .	60
4.1.4.1	Turbulenz . . . . .	60
4.1.4.2	Wärmeübergang und Strahlung . . . . .	61
4.1.4.3	Stoffgemische und Reaktionen . . . . .	63
4.1.4.4	Poröse Medien . . . . .	65
4.1.4.5	Mehrphasenströmungen . . . . .	67
4.1.5	Parallelisierung . . . . .	67
4.2	Methodik der dynamischen Systemsimulation . . . . .	68
<b>5</b>	<b>Entwicklung einer Anfahrstrategie</b>	<b>77</b>
5.1	Entwicklung eines Anfahrkonzepts für das Brennstoffzellensystem . . . . .	77
5.1.1	Thermischer Startvorgang des Systems . . . . .	78
5.1.2	Elektrischer Startvorgang des Systems . . . . .	84
5.1.3	Auswertung der Startkonzepte . . . . .	88
5.2	Strömungsdynamische Modellierung des Startvorgangs . . . . .	90
5.2.1	Erstellung eines transienten Modells für den Startvorgang . . . . .	90
5.2.1.1	Modellierung der porösen Medien . . . . .	90
5.2.1.2	Validierung des Modells . . . . .	91
5.2.1.3	Kopplung der einzelnen Reaktoren . . . . .	94
5.2.2	Strömungsdynamische Optimierung des Aufheizverhaltens . . . . .	95
5.3	Abschließende Auswertung der Startkonzepte . . . . .	102
<b>6</b>	<b>Erstellung und Optimierung des Hybridkonzeptes</b>	<b>105</b>
6.1	Analytische Herleitung des Hybridisierungsgrades . . . . .	105
6.2	Dynamische Simulation des Hybridsystems . . . . .	108
6.2.1	Direkte Hybridverschaltung . . . . .	111
6.2.2	Aktive Hybridverschaltung . . . . .	115
6.2.3	Startvorgang des Systems . . . . .	120
6.3	Fazit Hybridisierung . . . . .	124
<b>7</b>	<b>Packaging des Brenngaserzeugungssystems</b>	<b>127</b>
7.1	Simulationsmethodik zur Packageentwicklung . . . . .	127
7.1.1	Simulation des Packages 3 . . . . .	133
7.1.2	Simulationsunterstützte Wärmeübertragerentwicklung . . . . .	134
7.2	Entwicklung eines neuen Packagekonzepts . . . . .	137
7.2.1	Package 5: Thermisches Aufheizkonzept . . . . .	138
7.2.1.1	Entwicklung eines Wärmeübertragers für den Startvorgang . . . . .	138
7.2.1.2	Sensitivitätsanalyse des Startbrennerbetriebs . . . . .	140
7.2.1.3	Experimentelle Untersuchung des Mikrostrukturwärmeübertragers . . . . .	145
7.2.1.4	Fazit Package 5 . . . . .	145
7.2.2	Package 6: Elektrisches Aufheizkonzept . . . . .	146
7.3	Fazit des Packagings . . . . .	149

<b>8 Anwendung der Gesamtmethodik</b>	<b>153</b>
8.1 Zusammenführung der Ergebnisse . . . . .	157
8.2 Wichtigste Erkenntnisse dieser Arbeit . . . . .	161
<b>9 Zusammenfassung</b>	<b>163</b>
<b>A Ergänzende Informationen zu Kapitel 5</b>	<b>169</b>
A.1 Dynamische Systemsimulation . . . . .	169
A.2 Zusätzliche Ergebnisse der strömungsdynamischen Simulationen . . . . .	172
A.3 Benutzerdefinierte Funktion für die Kopplung des Druckes . . . . .	173
<b>B Ergänzende Informationen zu Kapitel 6</b>	<b>175</b>
<b>C Ergänzende Informationen zu Kapitel 7</b>	<b>177</b>
C.1 Wärmeübertrager für den Startvorgang . . . . .	178
C.2 Mikrostrukturwärmeübertrager . . . . .	180
C.3 Komponenten Package 6 . . . . .	184
<b>Nomenklatur</b>	<b>187</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>191</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>197</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>199</b>



# 1 Einleitung und Zielsetzung

Der Klimawandel ist eine der Herausforderungen der heutigen Zeit. Die Mitgliedsstaaten der Europäischen Union haben beschlossen die Treibhausgasemissionen bis zum Jahr 2020 gegenüber dem Jahr 1990 um 20 % zu verringern und die Energieeffizienz um 20 % zu steigern [1]. Weiterhin sollen die Treibhausgasemissionen bis zum Jahre 2050 um 80 % gegenüber dem Stand des Jahres 1990 reduziert werden. Der Aktionsplan sieht zur Erreichung dieses Ziels eine Veränderung der Emissionen im Verkehrssektor von +20 % bis - 9% bis zum Jahre 2030 vor. Dies bedeutet, dass die Emissionen in diesem Bereich um maximal 20 % bis zum Jahre 2030 ansteigen und im besten Fall bereits um 9 % reduziert werden können. Diese Abschätzung trägt dem steigenden Straßenverkehr Rechnung [1]. Bis zum Jahr 2050 hingegen sollen nach diesem Aktionsplan die Treibhausgasemissionen im Verkehrssektor um 54 % bis 67 % reduziert werden. Der betrachtete Verkehrsbereich schließt die Luftfahrt mit ein, klammert die Seefahrt jedoch aus. Nach [2] stieg der durch den Straßengüterverkehr verursachte Kraftstoffverbrauch von 1991 bis 2005 um 38,2 % an. In [3, S.141] wird die Zunahme der Treibhausgase im Straßenverkehr von 1990 bis 2012 zu 72 Millionen Tonnen CO<sub>2</sub>-Äquivalent angegeben. Dies entspricht nach [3, S.243] einer Zunahme der Treibhausgasemissionen von 9 %.

Für den Bereich des Personenverkehrs gibt es einen zunehmenden Trend zur Elektrifizierung des Antriebes. Somit werden in diesem Bereich zunehmend Hybridfahrzeuge oder reine Elektrofahrzeuge eingesetzt. Die benötigte Energie kann dann aus Erneuerbaren Energien bereitgestellt werden. Im Bereich der Nutzfahrzeuge wird jedoch auch in Zukunft die hohe Energiedichte der flüssigen Kraftstoffe benötigt. Die Energiedichte von Wasserstoff ist mit 33,3 kWh/kg deutlich höher als die Energiedichte von Ottokraftstoff mit 11,5 kWh/kg. Nach [4, S. 121] sinkt die Energiedichte bei der gasförmigen Speicherung des Wasserstoffs in einem 700 bar Drucktank auf Systemebene auf 1,8 kWh/kg und bei der flüssigen Speicherung bei 2 bar auf 2 kWh/kg im Vergleich zum Ottokraftstoff mit 8 kWh/kg deutlich ab. Die volumetrische Energiedichte von Wasserstoff ist mit 0,9 kWh/l bzw. 1,2 kWh/l im Vergleich zu 7 kWh/l ebenfalls deutlich niedriger. Wegen ihrem hohen Energiebedarf sind Nutzfahrzeuge auf ein Antriebssystem mit einer hohen Energie- und Leistungsdichte angewiesen. Zum aktuellen Zeitpunkt gibt es daher für den Verbrennungsmotor in Nutzfahrzeugen keine Alternative. Lastkraftwagen haben neben dem mechanischen Leistungsbedarf für den Antrieb auch einen Bedarf an elektrischer Energie. Bei Langstrecken-Lastkraftwagen wird auch während der Pausenzeiten Energie benötigt. Diese Energie wird eingesetzt, um die LKW-Kabine zu klimatisieren und die elektrischen Verbraucher in der Kabine zu versorgen. Zu diesen Verbrauchern gehören unter anderem Haushalts- und Unterhaltungsgeräte. Eine Option die benötigte Energie bereitzustellen ist den Verbrennungsmotor während der Rastzeit im Leerlauf weiter zu betreiben. Im Jahr 2003 wurde von Lutsey et al. [5] eine Umfrage unter LKW-Fahrern in den USA durchgeführt. Für diese Umfrage wurden 6 verschiedene Standorte ausgewählt. Die Umfrage ergab eine durchschnittliche Rastzeit von 6 Stunden pro Tag und damit etwa 1700 Stunden pro Jahr. Der Mittelwert der Leerlaufzeit

des Motors wird zu 34 % der gesamten Motorlaufzeit angegeben. Nach Brodrick et al. [6] beträgt die Zeit des Betriebs im Leerlauf 20 % bis 40 % der gesamten Motorlaufzeit. Der Wirkungsgrad des Verbrennungsmotors zur Versorgung der Nebenaggregate im LKW wird von Lutsey et al. [7] zu weniger als 10 % im Leerlauf angegeben. Von Brodrick et al. [6] wird der Wirkungsgrad im Leerlaufbetrieb zu 3 % und der Wirkungsgrad im Fahrbetrieb auf der Autobahn zu 40 % angegeben. In der Studie von Lutsey et al. [5] wurde der durchschnittliche Kraftstoffverbrauch im Leerlaufbetrieb zu 6057 Liter Diesel pro Jahr bestimmt. Es gibt beim Kraftstoffverbrauch jedoch deutliche Abweichungen, sodass 10 % der Fahrer mehr als 12870 Liter Diesel pro Jahr im Leerlaufbetrieb verbrauchen. In einer Untersuchung von Frey et al. [8] wurden die Daten von 20 Langstrecken-LKW einer privaten kommerziellen Flotte aufgenommen. Diese Lastkraftwagen waren in zwei Flotten aufgeteilt. Die Flotte A bestand aus Einzelfahrern. Diese Fahrer verwendeten eine Diesel-APU durchschnittlich 1010 Stunden im Jahr für Stops von 7 Stunden oder länger. Die aus Teamfahrern bestehende Flotte B verwendete die APU durchschnittlich für 97 Stunden im Jahr. Dies zeigt die starke Abweichung der Leistungsanforderungen im Nutzfahrzeugbereich.

Die Brennstoffzelle bietet im Bereich der Bordstromversorgung eine Option für eine effiziente Energieversorgung einer mobilen Anwendung. Brennstoffzellen bieten ein hohes Wirkungsgradpotential. Die am weitesten verbreitetsten Brennstoffzellen wandeln Wasserstoff und Sauerstoff in Wasser um und produzieren bei diesem Vorgang eine elektrische Leistung. Der Wasserstoff kann durch Elektrolyse von Wasser oder durch die Reformierung von Kohlenwasserstoffen gewonnen werden. Für die Bordstromversorgung ist besonders die Reformierung des für den Verbrennungsmotor verwendeten Kraftstoffs attraktiv. Dieser Kraftstoff kann im Lastkraftwagen in ein wasserstoffreiches Gemisch für die Brennstoffzelle umgewandelt werden. Durch dieses Verfahren kann auf einen Wasserstofftank verzichtet werden.

## 1.1 Motivation

Im Rahmen dieser Arbeit soll ein bestehendes Prototypensystem eines Brennstoffzellensystems für die Anwendung der Bordstromversorgung weiterentwickelt werden. Das aktuelle System besteht aus einer Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzelle (HT-PEFC) und einem Brenngaserzeugungssystem basierend auf der Reformierung von flüssigen Dieselkraftstoffen. Um dieses System in einem Lastkraftwagen einzusetzen, muss es jedoch gewisse Anforderungen erfüllen. Zu diesen Anforderungen gehört, dass das System autark ist. So soll es selbst startfähig sein und die benötigte Leistung bedarfsgerecht bereitstellen. Weiterhin sollte das System dynamisch sein. Es soll schnell startfähig sein und auf Leistungsbedarfsänderungen reagieren können. Das System sollte effizient sein und somit einen hohen Wirkungsgrad aufweisen. Für eine mobile Anwendung wird ein kompaktes System mit einer hohen Energie- und Leistungsdichte benötigt. In dieser Arbeit soll eine Methodik zur gesamtsystemischen Optimierung dieser Punkte erarbeitet werden. Bei der Weiterentwicklung des Systems wurden die drei Bausteine Startvorgang, Hybridisierung und Packaging identifiziert. In Abbildung 1.1 sind die Anforderungen an ein Brennstoffzellensystem zusammen mit den drei Bausteinen dieser Arbeit

graphisch dargestellt.

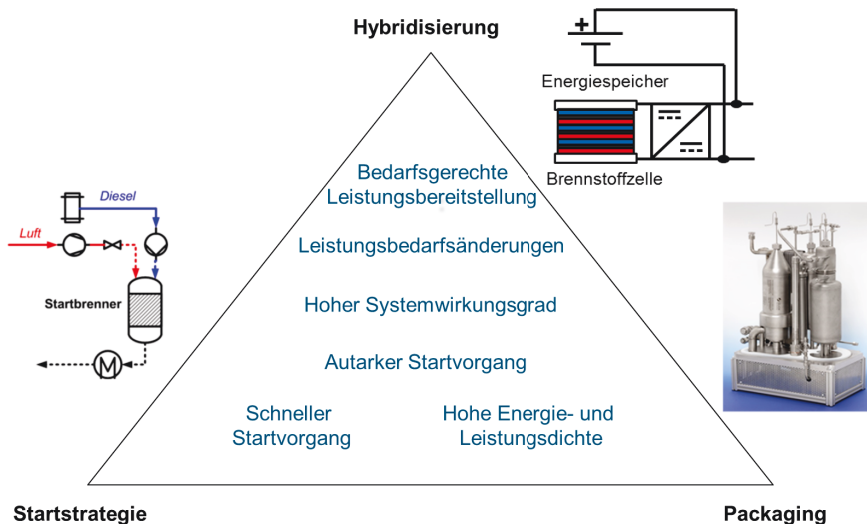


Abb. 1.1: Anforderungen an ein System zur Bordstromversorgung und Themengebiete dieser Arbeit

## 1.2 Zielsetzung

Das Ziel dieser Arbeit ist die vernetzte Betrachtung und gesamtsystemische Optimierung der drei Bausteine Startvorgang, Hybridisierung und Packaging. In dieser Arbeit wird eine Methodik zur Systementwicklung und Optimierung entwickelt und diese Methodik auf das bestehende System angewendet. Beim Startvorgang muss ein Konzept für einen autarken Startvorgang des Systems entwickelt werden. Zur Bewertung dieses Konzepts sollen einerseits dynamische Systemmodelle in MATLAB/Simulink und andererseits strömungsdynamische Simulationen verwendet werden. In einem weiteren Schritt sollen für das System ein Hybridisierungskonzept entwickelt werden. Dieses baut auf dem Startvorgang des Systems auf. Beim Packaging soll ein möglichst kompaktes Package mit einem geringen Druckverlust entwickelt werden. Bei diesem Package müssen die benötigten Temperaturniveaus für die Reaktionen eingehalten werden. Um diese Ziele realisieren zu können, müssen gesamte Reaktoren bis hin zum Package in Kontrollvolumen eingeteilt und berechnet werden können. Das entwickelte Startkonzept soll im Rahmen des Packages umgesetzt werden. Die Gesamtmethodik wird angewendet, um ein System-Package zu entwickeln und zu optimieren. Die Hauptziele dieser Arbeit wurden in die folgenden Punkte unterteilt:

### 1. Methodik:

- Entwicklung einer Methodik zur Systementwicklung mit den Schwerpunkten:
  - Startvorgang
  - Hybridisierung
  - Packaging

### 2. Startvorgang

- Entwicklung eines Konzepts für den Startvorgang
- Bewertung des erstellten Konzepts durch dynamische Simulationen
- Erstellung eines Modells zur transienten strömungsdynamischen Simulation des Brenngaserzeugungssystems
- Optimierung des Startvorgangs durch strömungsdynamische Simulationen

### 3. Hybridisierung

- Dimensionierung der Komponenten für die Anwendung der Bordstromversorgung
- Bewertung verschiedener Hybridverschaltungen
- Bewertung verschiedener Betriebsstrategien
- Festlegung einer Hybridverschaltung und einer Betriebsstrategie

### 4. Packaging

- Entwicklung einer Methodik zur Berechnung des Brenngaserzeugungssystems
- Umsetzung des Startvorgangs in einem neuen Package
- Dreidimensionale Simulation eines neuen Packages

### 5. Anwendung der Gesamtmethodik

Diese einzelnen Schritte müssen bei der Bearbeitung stark vernetzt betrachtet werden, um ein in allen Bereichen optimiertes System zu erhalten.

## 1.3 Methodik

Die Methodik dieser Arbeit basiert auf einer gekoppelten Betrachtung der bei der Zielsetzung beschriebenen drei Bausteine durch Experimente und Simulationen. Basierend auf einem breiten Literaturüberblick werden die Aufgaben in dieser Dissertation erarbeitet. In den einzelnen Themengebieten werden Konzepte erstellt, die mit thermodynamischen Berechnungen überprüft werden. Basierend auf diesen Konzepten werden dynamische Systemsimulationen durchgeführt und dadurch die Konzepte überprüft und bewertet. Die drei Themen müssen stark vernetzt betrachtet werden. Die dynamische Systemsimulation muss somit für die Berechnung des Startvorgangs und des Betriebs im Hybridsystem geeignet sein. Die Ergebnisse

innerhalb der einzelnen Bausteine werden an definierten Schnittstellen an die anderen Bausteine übergeben. Um genauere Aussagen für die einzelnen Komponenten treffen zu können, werden diese durch strömungsdynamische Simulationen beschrieben und optimiert. Ergebnisse von Experimenten mit dem existierenden Brennstoffzellensystem und Versuche mit einzelnen Komponenten werden verwendet, um die Simulationsmodelle und -ergebnisse zu validieren und um die Randbedingungen für die Simulationen zu setzen.

## 1.4 Gliederung der Arbeit

1. In Kapitel 2 werden die Grundlagen dieser Arbeit beschrieben. In diesem Kapitel wird auf die Brennstoffzellenhybridsysteme, Brennstoffzellen und Batterien eingegangen. Weiterhin wird die Brenngaserzeugung basierend auf flüssigen Kraftstoffen vorgestellt und die für diese Arbeit benötigten Komponenten evaluiert.
2. Der Stand der Technik und Forschung wird in Kapitel 3 beschrieben. Zuerst wird in diesem Kapitel auf die Komponenten- und Systementwicklung im IEK-3 eingegangen und die bereits durchgeführten Arbeiten beschrieben. An diese Darstellung schließt sich ein Gesamtliteraturüberblick an. Aus diesen Ergebnissen werden Erkenntnisse hinsichtlich der weiteren benötigten Arbeitsschritte abgeleitet.
3. Das methodische Vorgehen in dieser Arbeit wird in Kapitel 4 vorgestellt. Diese Methodik basiert auf der Entwicklung der drei Bausteine Startvorgang, Hybridisierung und Packaging. Als Werkzeuge innerhalb dieser Methodik werden thermodynamische Berechnungen, dynamische Systemsimulationen und orts aufgelöste zwei- und dreidimensionale Berechnungen durchgeführt. Diese werden durch Experimente mit dem bestehenden System und Einzelkomponentenversuche validiert und unterstützt. In diesem Kapitel werden zuerst die für die strömungsdynamischen Simulationen benötigten Gleichungen und Modelle beschrieben. Anschließend wird das für die dynamischen Systemsimulationen entwickelte Modell näher beschrieben.
4. In Kapitel 5 wird die Entwicklung einer Anfahrstrategie beschrieben. Es werden Konzepte für den Startvorgang entwickelt und diese dann mit dynamischen Systemsimulationen überprüft. Weiterhin werden transiente CFD-Berechnungen des Startvorgangs durchgeführt.
5. Das Hybridisierungskonzept wird in Kapitel 6 untersucht. Durch dynamische Simulationen werden die Verschaltung der Komponenten, die Betriebsweise des Hybridsystems und der Einfluss des Startvorgangs aufgezeigt.
6. Die kompakte Bauweise im Rahmen des Packagings wird in Kapitel 7 betrachtet. Hierzu werden verschiedene Vernetzungsmethoden mit dem Ziel, ganze Reaktoren vernetzen zu können, angewendet und ausgewertet. Diese Methodik wird am Beispiel des Reformers und eines Wärmeübertragers überprüft und für verschiedene Packagekonzepte angewendet.



7. Die Anwendung der entwickelten Gesamtmethodik auf die Systementwicklung wird in Kapitel 8 beschrieben.
8. Zum Schluss werden die Ergebnisse dieser Arbeit in Kapitel 9 zusammengefasst und es wird ein Ausblick für die weitere Anwendung der entwickelten Methodik gegeben.

## 2 Grundlagen

Dieses Kapitel befasst sich mit den Grundlagen eines Hybridsystems basierend auf einer Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzelle (HT-PEFC). Eine Brennstoffzelle erzeugt aus zugeführtem Wasserstoff und Sauerstoff elektrische Energie und Abwärme bei der Produktion von Wasser. Das in dieser Arbeit betrachtete Brennstoffzellensystem zeichnet sich durch die Verwendung eines flüssigen Kraftstoffs mit einer hohen Energiedichte aus. Der Kraftstoff wird dann in einem Brenngaserzeugungssystem in ein wasserstoffreiches Gas (Reformat) für die Brennstoffzelle umgewandelt. Die Produktion des Reformats geschieht unmittelbar bevor es in der Brennstoffzelle umgesetzt wird. Es findet bei diesem System keine Speicherung von Wasserstoff statt. Beim Start des Brennstoffzellensystems ist ein elektrischer Energiespeicher notwendig, um die Peripherie antreiben zu können. Durch die Kombination der Brennstoffzelle mit diesem zusätzlichen Energiespeicher ergeben sich im Betrieb weitere Vorteile. Die Brennstoffzelle muss in dem Hybridsystem nicht sehr dynamisch auf Leistungsbedarfsänderungen reagieren, was die Lebensdauer der Brennstoffzelle erhöht. Weiterhin können Betriebsbereiche des Brennstoffzellensystems mit einem niedrigen Wirkungsgrad vermieden werden. Somit können durch die Hybridisierung des Brennstoffzellensystems die Schwachstellen des Systems ausgemerzt werden.

In diesem Kapitel wird zuerst auf die Brennstoffzellenhybridsysteme eingegangen. Dabei wird speziell die Leistungsaufteilung zwischen der Brennstoffzelle und der Batterie betrachtet. Danach werden der Aufbau und die Funktionsweise von Brennstoffzellen detailliert beschrieben. Es wird speziell auf die Eigenschaften der HT-PEFC eingegangen. Die Brenngasversorgung der HT-PEFC durch die Reformierung von Mitteldestillaten wird danach erläutert. Zum Schluss werden die für die Hybridisierung notwendigen Energiespeicher diskutiert.

### 2.1 Brennstoffzellenhybridsysteme

Der Begriff des Hybridsystems ist vor allem durch die Anwendung in Personenkraftwagen bekannt. Es wird zwischen seriellen und parallelen Hybridsystemen unterschieden. Bei den seriellen Hybridsystemen treibt ein Elektromotor das Getriebe an. Der benötigte Strom wird durch einen Generator aus einem Verbrennungsmotor erzeugt und wird teilweise in einem Energiespeicher gespeichert. Beim parallelen Hybridsystem sind sowohl ein Verbrennungsmotor, als auch ein Elektromotor mit dem Getriebe verbunden. Somit ist sowohl ein rein elektrischer, als auch ein Betrieb mit Verbrennungsmotor möglich. Brennstoffzellenhybridsysteme stellen eine Sonderform der seriellen Hybridisierung dar, da die Brennstoffzelle die chemisch gebundene Energie im Kraftstoff direkt in elektrische Energie und Reaktionswärme umgewandelt. Brennstoffzellenhybridsysteme bestehen aus mindestens einer Brennstoffzelle und einem elektrischen Energiespeicher. Bei dem Hybridsystem muss die Brennstoffzelle die benötigte elektrische Energie des

Systems erzeugen. Die Brennstoffzelle muss für einen netzunabhängigen Betrieb mindestens die durchschnittlich benötigte Leistung bereitstellen können. Die Batterie deckt die Differenz zwischen der aktuell benötigten und der von der Brennstoffzelle produzierten Leistung ab. Die Batterie wird bei einem hohen Leistungsbedarf entladen und kann bei einem niedrigen Leistungsbedarf wieder geladen werden. Die Besonderheiten von Brennstoffzellen und Energiespeichern werden in den Abschnitten 2.2 und 2.4 erläutert. Auf Verschaltungskonzepte für diese Komponenten wird in Kapitel 3.2 näher eingegangen.

Die entscheidende Kenngröße für die Dimensionierung des Hybridsystems ist der Hybridisierungsgrad DOH. Nach Liu et al. [9] ist der Hybridisierungsgrad gemäß Gleichung 2.1 definiert. Dieser beschreibt das Verhältnis der elektrischen und der gesamten Leistung der Energiewandler und -speicher. Die gesamte Leistung setzt sich aus der Leistung des Elektromotors und der Leistung des Verbrennungsmotors zusammen. Gemäß dieser Definition bedeutet ein Hybridisierungsgrad von eins ein rein elektrisch betriebenes Fahrzeug ohne Verbrennungsmotor und ein Hybridisierungsgrad von null ein konventionelles Fahrzeug mit Verbrennungsmotor.

$$DOH = \frac{P_{elek}}{P_{elek} + P_{VM}} = \frac{P_{elek}}{P_{gesamt}} \quad (2.1)$$

Diese Größe wird in ähnlicher Weise auch für Brennstoffzellensysteme angewendet. Es gibt in der Literatur verschiedene Definitionen für den Hybridisierungsgrad. Nach [10] wird dieser als Verhältnis der Differenz von der maximalen Leistung und der Brennstoffzellenleistung und der maximalen Leistung entsprechend Gleichung 2.2 definiert.

$$DOH = \frac{P_{max} - P_{Brennstoffzelle}}{P_{max}} \quad (2.2)$$

Wilhelm [11] definiert den Hybridisierungsgrad als Leistung der Batterie durch die Gesamtleistung. Diese Definitionen sind sehr ähnlich zu der allgemeinen Definition in Gleichung 2.1. Von Wilhelm [11] wurde gezeigt, dass es bei der Definition deutliche Unterschiede gibt, je nachdem ob die gesamte Leistung als maximale Leistung des Elektromotors oder als Leistung von Brennstoffzelle und Batterie gewählt wird. In dieser Arbeit wird der Hybridisierungsgrad entsprechend Gleichung 2.3 definiert. Dies entspricht ebenfalls Gleichung 2.2, wenn als maximale Leistung die Summe aus der Leistung von Brennstoffzelle und Batterie gewählt wird.

$$DOH = \frac{P_{Batterie}}{P_{Batterie} + P_{Brennstoffzelle}} \quad (2.3)$$

Bei beiden Definitionen bedeutet ein Hybridisierungsgrad von null ein reines Brennstoffzellensystem. Der andere Grenzfall ist bei einem Hybridisierungsgrad von eins, was ein reines Batteriesystem beschreibt. Sowohl eine Veränderung der Brennstoffzellen- als auch der Batterieleistung wirkt sich direkt auf den Hybridisierungsgrad aus. Eine Einteilung der Hybridsysteme entsprechend der Größenverhältnisse wurde von Jossen et al. [12] vorgestellt. Das Größenverhältnis kann als Hybridisierungsgrad interpretiert werden. Diese Einteilung wurde für Brennstoffzellenfahrzeuge durchgeführt, kann jedoch auch in ähnlicher Form für eine Bordstromversorgung

angewandt werden. Dieses Diagramm ist in vier Bereiche eingeteilt. Der Brennstoffzelle kommt bei einem niedrigen Hybridisierungsgrad eine Hilfs- und Erhaltungsfunktion zu (Bereich 1). Die Brennstoffzelle sorgt in diesem Bereich dafür, dass die Batterie nicht tiefentladen wird. Mit steigendem Hybridisierungsgrad dient die Brennstoffzelle als Range-Extender (Bereich 2). Die Brennstoffzelle sorgt mit einer relativ geringeren Leistung dafür, dass die Batterie wieder geladen wird und die Reichweite des Fahrzeuges erhöht wird. Im nächsten Bereich mit weiter zunehmendem Hybridisierungsgrad wird von einem dualen Leistungssystem gesprochen (Bereich 3). In diesem Bereich sind sowohl die Batterie, als auch die Brennstoffzelle in der Lage die benötigte Leistung für den Antrieb bereitzustellen. Mit weiter zunehmendem Hybridisierungsgrad wird die Batterie ausschließlich für den Spitzenlastausgleich und die Unterstützung beim Kaltstart benötigt (Bereich 4). Die Brennstoffzelle stellt die benötigte Leistung für den Antrieb bereit.

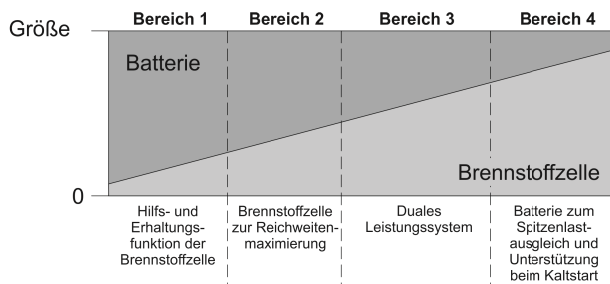


Abb. 2.1: Aufgabenverteilung im Hybridsystem bei verschiedenen Auslegungen [12]

Brennstoffzellen wandeln die chemisch gebundene Energie in Wärme und elektrische Energie um. Wenn bei der Brennstoffzelle ein negativer Strom angelegt wird, kommt es in der Zelle zur Elektrolyse. Dies führt zu einer Materialkorrosion aufgrund der bei der Elektrolyse auftretenden höheren Spannungen. Aus diesem Grund kann die Brennstoffzelle ausschließlich Leistung liefern und keine Leistung aufnehmen. Der Energiespeicher im System wird benötigt, um sowohl Energie zu speichern, als auch diese wieder abgeben zu können. Prinzipiell sind bei elektrischen Verschaltungen sowohl Reihen- als auch Parallelschaltung möglich. Da die Brennstoffzelle jedoch nur Strom liefern, aber nicht aufnehmen kann, ist bei einem Brennstoffzellenhybrid ausschließlich eine Parallelschaltung möglich. Bei der Verschaltung von Hybridsystemen wird zwischen der direkten und indirekten Hybridisierung unterschieden. Bei der direkten Hybridisierung werden Brennstoffzelle und Batterie direkt verschaltet, wohingehend bei indirekten Hybridsystemen eine aktive Leistungselektronik verwendet wird. Beide Konzepte sind in Abbildung 2.2 dargestellt. Bei dem aktiven Hybrid werden die Spannungsniveaus von Brennstoffzelle und Batterie durch eine Leistungselektronik entkoppelt. Hierzu werden Gleichstromspannungswandler eingesetzt.

Auf die verschiedenen Verschaltungskonzepte wird in Kapitel 3.2 ausführlich eingegangen. In den nächsten Abschnitten werden die Hauptkomponenten der Brennstoffzellenhybridsysteme dargestellt.

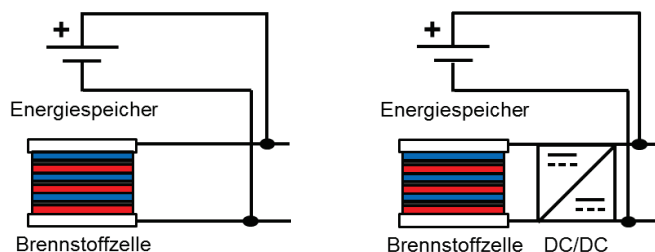


Abb. 2.2: Direkte Verschaltung von einer Brennstoffzelle und Batterie (links) und Verschaltung mittels Leistungselektronik (rechts)

## 2.2 Brennstoffzellen

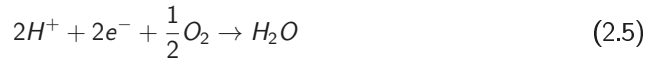
Eine Brennstoffzelle ist ein elektrochemischer Energiewandler. Damit die Brennstoffzelle elektrische Energie erzeugen kann, müssen Stoffströme zugeführt werden. In der Brennstoffzelle wird die chemisch gebundene Energie der zugeführten Stoffströme in elektrische Energie und Wärme umgewandelt. Die Funktionsweise der Brennstoffzelle beruht auf der räumlichen Trennung zwischen Oxidations- und Reduktionsreaktionen. Eine Brennstoffzelle besteht aus zwei Elektroden und einem Elektrolyten. Je nach Betriebstemperatur kommen unterschiedliche Materialien zum Einsatz. Bei Temperaturen oberhalb von 400 °C werden Keramiken oder Salzschnmelzen als Elektrolyt verwendet. Bei diesen hohen Temperaturen kann Kohlenmonoxid umgesetzt werden und der Einsatz von günstigen Ni-Katalysatoren ist möglich. Die Brennstoffzellen, die bei diesen hohen Temperaturen arbeiten, sind die Festoxidbrennstoffzelle (SOFC: solid oxide fuel cell) und die Schmelzkarbonatbrennstoffzelle (MCFC: molten carbonate fuel cell). Bei den Niedertemperaturbrennstoffzellen ist die PEFC die am weitesten entwickelte Variante. Der Elektrolyt besteht bei dieser Brennstoffzelle aus einer Polymerelektrolytmembran, üblicherweise Nafion<sup>®</sup>, und bei den Elektroden wird ein Platinkatalysator verwendet. Die Stoffströme in einer Polymerelektrolytbrennstoffzelle sind in Abbildung 2.3 links veranschaulicht. Es ist eine Membran-Elektroden-Einheit MEA ("membrane electrode assembly") dargestellt.

Der Wasserstoff  $H_2$  wird durch eine Bipolarplatte zur Anode geleitet und dort durch eine Diffusionsschicht auf die Katalysatorschicht homogen verteilt. In der Katalysatorschicht wird der Wasserstoff oxidiert, wodurch pro Wasserstoffmolekül zwei Wasserstoffprotonen  $H^+$  und Elektronen  $e^-$  gemäss Gleichung 2.4 entstehen.



Die Protonen können durch die Polymerelektrolytmembran diffundieren, wobei diese Schicht elektrisch isolierend wirkt. Die Elektronen müssen, um auf die Kathode zu gelangen, durch einen äußeren Stromkreis fließen. Auf der Kathodenseite wird durch eine Bipolarplatte Sauerstoff zugegeben, der wiederum durch die Diffusionsschicht homogen verteilt wird. In der Katalysatorschicht reagieren die durch die Membran diffundierten Wasserstoffprotonen mit dem Sauerstoff und den

Elektronen nach Gleichung 2.5. Sowohl das entstehende Wasser, als auch die nicht umgesetzten Gase werden durch die Bipolarplatten wieder abgeführt.



In dieser Arbeit soll ein System für eine mobile Arbeit entwickelt werden. Für ein mobiles Einsatzgebiet eignen sich vor allem Niedertemperaturbrennstoffzellen aufgrund der guten Dynamik dieser Zellen. Die Verwendung einer Polymerelektrolytbrennstoffzelle (PEFC) birgt jedoch in Verbindung mit der Reformierung von Mitteldestillaten einige Nachteile. Die PEFC benötigt sehr reinen Wasserstoff mit einer geringen CO-Konzentration. Die CO-Konzentration muss für diese Brennstoffzelle weniger als 100 ppmv betragen. Aufgrund der ansonsten absinkenden Stromdichte sollte die Konzentration jedoch weniger als 10 ppmv betragen [13, 14]. Eine relativ neue Brennstoffzellenart wird als Hochtemperatur-Polymerelektrolytbrennstoffzelle (HT-PEFC) bezeichnet. Die HT-PEFC besitzt im Vergleich zur PEFC einige systemtechnische Vorteile. Durch die höhere Arbeitstemperatur steigt die Toleranz gegenüber Kohlenmonoxid an. Bendzulla [15, S. 157] gibt für die CO-Toleranz eine Kohlenmonoxidkonzentration von 1 % bei 140 °C und 2,5 % bei 160 °C an. Der Nachteil der HT-PEFC ist, dass sie auf eine Temperatur oberhalb des Taupunktes von Wasser aufgewärmt werden muss, bevor die Brennstoffzelle in Betrieb genommen werden kann. Ansonsten kann es zu einer Auswaschung der Phosphorsäure im Elektrolyten und damit zur Schädigung der Zelle kommen. Die entstehende Abwärme kann bei dieser Brennstoffzelle aufgrund der Temperatur von 160 °C sehr gut genutzt werden und die der Brennstoffzelle zugeführten Gase müssen nicht befeuchtet werden. Die theoretisch nutzbare Spannung der HT-PEFC liegt bei 1,185 V und sinkt durch die Polarisation ab. Um die für die Anwendung benötigte Spannung zu erreichen, werden die Brennstoffzellen gestapelt und zu einem Brennstoffzellenstack zusammen gefügt. Ein Beispiel eines HT-PEFC-Stacks ist in Abbildung 2.3 rechts dargestellt.

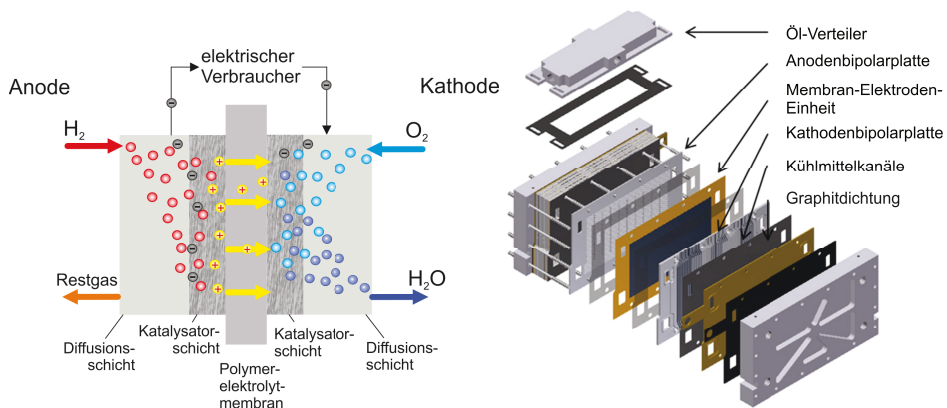


Abb. 2.3: Schematischer Aufbau einer Brennstoffzelle (links) [15] und Explosionszeichnung eines HT-PEFC-Stacks (rechts) [16]

Die Membran-Elektroden-Einheit wird von beiden Seiten von einer Bipolarplatte umschlossen. Dieser Aufbau aus MEA und Bipolarplatte wird üblicherweise so oft wiederholt, bis die gewünschte Spannung des Stacks erreicht ist. Durch die Reihenschaltung der einzelnen Zellen kommt es zu einer Addierung der Spannungen der Einzelzellen. Die einzelnen Bauteile werden jeweils abgedichtet, sodass die Gase nicht nach außen austreten oder auf die andere Elektroden-seite gelangen können. Neben den Zuleitungen für die Gase müssen auch Kanäle und Zuleitungen für das Thermoöl oder ein anderes Kühlmittel vorgesehen werden. Der Stack wird durch eine Stromabnehmerplatte auf jeder Seite und eine elektrisch isolierte Endplatte abgeschlossen. Die Endplatte dient in diesem Aufbau zur mechanischen Verspannung des Stacks.

Der Zusammenhang zwischen der Zellspannung und dem Strom oder der Stromdichte einer Zelle wird in einer Strom-Spannungskurve dargestellt. Diese wird auch als Polarisationskurve bezeichnet. In Abbildung 2.4 ist eine solche Polarisationskurve dargestellt. Diese wurde von Lücke et al. [17] für einen HT-PEFC-Stack für verschiedene Betriebsweisen gemessen. Auf der Kathodenseite wurde immer trockene Luft zugeführt, während auf der Anodenseite einerseits reiner Wasserstoff, andererseits aber synthetisches Reformat zugegeben wurde. Das synthetische Reformat war aus 42,1 Vol-% Wasserstoff, 56,9 Vol-% Stickstoff und 1 Vol-% Kohlenmonoxid zusammengesetzt. Der Kohlendioxidanteil, der normalerweise im Reformat ist, wurde durch Stickstoff ersetzt.

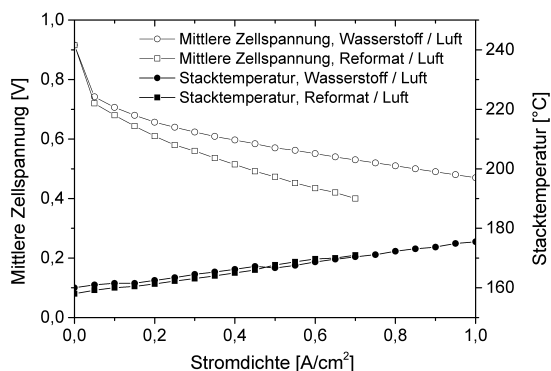


Abb. 2.4: Polarisationskurve einer HT-PEFC [17] Stöchiometrie 2/2 Kühlmittelstrom  $1,5 \frac{\text{L}}{\text{min}}$  Kühlmitteltemperatur 160 °C

Mit zunehmender Stromdichte fällt die mittlere Zellspannung der Brennstoffzelle ab. Sowohl die Kennlinie für den Wasserstoff- als auch die Kennlinie für den Reformatbetrieb fällt ausgehend von der offenen Zellspannung zu Beginn stark ab. Dieser Abfall ist auf die Polarisationsüberspannung zurück zu führen. Mit weiter steigender Stromstärke sinkt die Spannung bedingt durch den ohmschen Widerstand der Zelle linear ab. Bei der hier dargestellten Polarisationskurve handelt es sich um eine stationäre Polarisationskurve. In Abbildung 2.4 ist neben der

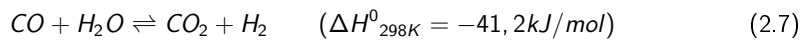
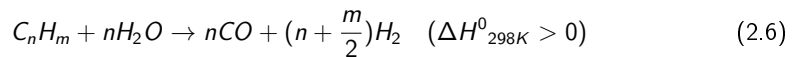
Spannung auch immer die dazugehörige Temperatur dargestellt. Durch den Betrieb mit Reformat sinkt der Strom bei einer Spannung von 0,6 V um 44 % und bei 0,5 V um 50 % im Vergleich zum Wasserstoffbetrieb. Bei einer konstanten Stromdichte sinkt die Spannung im Fall von 0,3 A/cm<sup>2</sup> um 10 % und bei 0,6 A/cm<sup>2</sup> um 21 %.

Aufgrund der hohen Toleranz gegenüber Kohlenmonoxid und den zusätzlichen Vorteilen im System wird die HT-PEFC für den Aufbau des System ausgewählt. Die Brenngaserzeugung für die Brennstoffzelle wird im nächsten Abschnitt beschrieben.

## 2.3 Brenngaserzeugung für Brennstoffzellen

Das Ziel der Brenngaserzeugung ist es, aus einem gasförmigen oder flüssigen Kraftstoff ein wasserstoffreiches Gasmisch (Reformat) zu erzeugen. In diesem Unterkapitel werden die chemischen Reaktionen der Brenngaserzeugung betrachtet. Für die Erzeugung eines wasserstoffreichen Reformats gibt es drei weit verbreitete Reformierungsverfahren. Bei diesen Verfahren handelt es sich um die Dampfreformierung, die partielle Oxidation und die autotherme Reformierung. Diese werden im Folgenden kurz beschrieben und miteinander verglichen. Die Wahl des Reformierungsverfahrens beeinflusst neben der Wahl des Katalysators die Reaktorauslegung entscheidend.

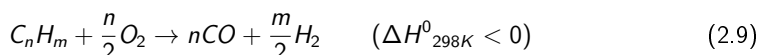
Bei der Dampfreformierung reagiert der Kohlenwasserstoff mit Wasser zu Kohlenmonoxid und Wasserstoff entsprechend Gleichung 2.6. Neben dieser Hauptreaktion laufen weitere Nebenreaktionen ab. Das Kohlenmonoxid reagiert mit Wasser zu Kohlendioxid und Wasserstoff (Gleichung 2.7). Diese Reaktion wird auch als Wassergasshiftreaktion bezeichnet. Der Wasserstoffanteil im Produktgas wird durch diese Reaktion erhöht. Weiterhin läuft die Methanisierungsreaktion entsprechend Gleichung 2.8 ab. Bei dieser Reaktion kommt es zu einer ungewollten Reaktion von Kohlenmonoxid und Wasserstoff zu Methan und Wasser. Die Dampfreformierungsreaktion ist endotherm, wobei die Wassergasshiftreaktion und die Methanisierung exotherm sind. Die Reaktionen 2.7 und 2.8 sind Gleichgewichtsreaktionen. In wie weit diese ablaufen, wird durch die Temperatur und den Druck bestimmt.



Ein weiteres Reformierungsverfahren ist die partielle Oxidation. Bei der partiellen Oxidation findet die Reformierung des Kohlenwasserstoffs in einer Sauerstoffumgebung statt. Hier reagieren Kohlenwasserstoffe in einer exothermen Reaktion mit Sauerstoff. Bei dieser Reaktion



entstehen ebenfalls Kohlenmonoxid und Wasserstoff. In der Praxis wird anstelle von reinem Sauerstoff Luft verwendet, was zu einer Verdünnung des Wasserstoffs mit Stickstoff führt. Die Bruttoreaktion ist in Gleichung 2.9 dargestellt. Bei der partiellen Oxidation findet keine weitere Steigerung des Wasserstoffanteils durch die Wassergasshiftreaktion statt, da der Wasserdampf für die Reaktion fehlt.



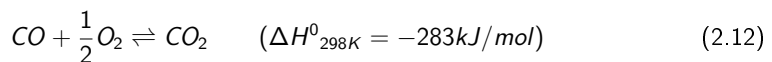
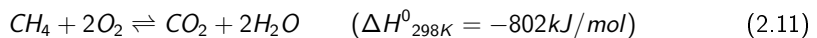
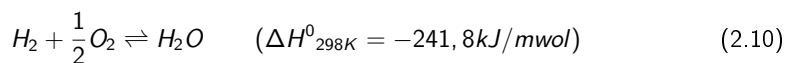
Das dritte Reformierungsverfahren ist die autotherme Reformierung. Als autotherme Reformierung wird eine Reformierungsreaktion bezeichnet, bei der sowohl die Dampfreformierung, als auch die partielle Oxidation ablaufen. Die bei der partiellen Oxidation entstehende Reaktionswärme wird direkt für die Dampfreformierung verwendet. Laut Samsun [18, S.47] werden bei einem Sauerstoff zu Kohlenstoffverhältnis von 0,47 und einem Wasser zu Kohlenstoffverhältnis von 1,90 94 % des Kraftstoffs durch die partielle Oxidation umgewandelt und 6 % durch die Dampfreformierung. Die partielle Oxidation läuft soweit ab, bis der Sauerstoff verbraucht ist. Im Folgenden wird mit autothermer Reformierung stets die Kombination von Dampfreformierung und partieller Oxidation bezeichnet.

Jedes dieser Reformierungsverfahren hat seine eigenen Vor- und Nachteile. Die Dampfreformierung weist den höchsten Wasserstoffanteil im Produktgas auf. Dies führt zu einem hohen Systemwirkungsgrad. Weiterhin müssen für die Wasser- und Kraftstoffzufuhr nur Pumpen verwendet werden, um die Edukte bereitzustellen. Der Leistungsbedarf der Peripherie fällt sehr gering aus. Die Nachteile der Dampfreformierung liegen im endothermen Reaktionsverlauf begründet. Die benötigte Wärmezufuhr für die Reaktion muss durch einen Wärmeübertrager bereit gestellt werden. In der Regel wird zur Bereitstellung der Wärme Kraftstoff verbrannt, wofür Verbrennungsluft bereitgestellt werden muss. Die Anfahrzeit des Systems wird maßgeblich durch die Zeit bis zur Dampfbereitstellung beeinflusst. Der Monolith kann hier jedoch auch durch einen integrierten Wärmeübertrager aufgeheizt werden. Die Reaktionsgeschwindigkeit bei der Dampfreformierung ist im Vergleich zur partiellen Oxidation sehr langsam. Dadurch muss der Reaktor größer dimensioniert werden. Die Wärme des katalytischen Brenners kann für die Dampferzeugung und gegebenenfalls für die Reaktionswärme verwendet werden. Die partielle Oxidation zeichnet sich durch die sehr schnelle Reaktionsgeschwindigkeit aus. Die Größe des Monolithen kann klein gewählt und der Reaktor kompakt gebaut werden. Die Reaktionswärme muss durch einen Wärmeübertrager abgeführt werden. Durch die hohen Reaktionsgeschwindigkeiten kann es lokal zu Überhitzungen im Material kommen. Bei der Auslegung der Reaktoren muss darauf geachtet werden. Die partielle Oxidation zeichnet sich durch eine sehr schnelle Startzeit aus. Die Hauptherausforderungen sind nach Khan et al. [19] die Desaktivierung des Katalysators aufgrund von Rußbildung, Überhitzungen und Verstopfungen im Katalysator. Ein weiterer Nachteil des Verfahrens ist der hohe Verdichtungsanfang für die Luft. Eine Nutzung der Abwärme ist für dieses Reformierungsverfahren nicht möglich. Die autotherme Reformierung verbindet beide Reformierungsverfahren. Aufgrund der langsamen Dampfreformierung muss der Katalysator größer dimensioniert werden als bei der partiellen Oxidation. Es ist jedoch kein Wärmeübertrager für die Zu- oder Abfuhr der Reaktionswärme notwendig,

da sich die Wärmeproduktion und der Wärmeverbrauch teilweise ausgleichen. Dies wirkt sich positiv auf den benötigten Bauraum aus. Die Einbindung der Katalytbrennerabwärme ist hier möglich und sinnvoll. Wenn der Reformier durch die partielle Oxidationsreaktion aufgewärmt wird, sind sehr schnelle Aufheizzeiten realisierbar. Bei einer Zündung im ATR-Betrieb muss ebenfalls Wasserdampf bereitgestellt werden, wodurch die Startzeiten im Bereich der Dampfreformierung liegen. Die autotherme Reformierung stellt in vielen Bereichen einen Kompromiss zwischen der Dampfreformierung und der partiellen Oxidation dar. Sie ist aufgrund des geringen Platzbedarfs besonders für mobile Anwendungen geeignet.

Nach der Reformierung findet eine Gasnachbehandlung statt. Die Ausführung der Gasnachbehandlung hängt sehr stark von der verwendeten Brennstoffzellenart ab. Für eine HT-PEFC reicht eine Reduzierung des Kohlenmonoxidanteils auf 1% aus. Eine Reduzierung des Kohlenmonoxidanteils von 10 % auf 1 % ist durch die Verwendung eines zweistufigen Wassergasshiftreaktors möglich. In diesem wird Kohlenmonoxid entsprechend Gleichung 2.7 umgesetzt. Eine Kohlenmonoxidfeinreinigung wäre nur für eine PEFC notwendig. Auf diese wird an dieser Stelle nicht näher eingegangen.

Der Wasserstoff im Reformat kann nicht vollständig in der Brennstoffzelle umgewandelt werden. Durch die Verdünnung des Reformats mit Stickstoff und die nicht umsetzbaren Gase muss die Brennstoffzelle permanent durchströmt werden. Ein Betrieb der Brennstoffzelle mit einer geschlossenen Anode würde zu einer Anreicherung der inerten Stoffe und zu einer Abreicherung des Wasserstoffanteils führen. Ein Betrieb mit einem geschlossenen Auslass der Anode, wie er bei der PEFC im Wasserstoffbetrieb verwendet werden kann, ist hier aus diesem Grunde nicht denkbar. Das Anodenrestgas wird einem katalytischen Brenner zugeführt. In diesem wird es unter Zugabe von Luft katalytisch verbrannt. Es laufen die Oxidationsreaktionen nach den Gleichungen 2.10 bis 2.12 ab. Die bei diesen Reaktionen entstehende Wärme kann für die Verdampfung von Wasser und die anschließende Überhitzung des Wasserdampfes genutzt werden.



In dieser Arbeit wird die HT-PEFC aufgrund der höheren CO-Toleranz gegenüber der PEFC bevorzugt. Die autotherme Reformierung ist aufgrund ihrer Eigenschaften für mobile Anwendungen gut geeignet. Aus dieser Kombination ergibt sich die Notwendigkeit eines zweistufigen Wassergasshiftreaktors. Eine Kohlenmonoxidfeinreinigung hingegen ist nicht notwendig. Um die Emissionen des Systems zu senken, muss das Anodenrestgas in einem katalytischen Brenner oxidiert werden. Die entstehende Wärme wird für die Dampferzeugung verwendet.

## 2.4 Energiespeicher

Der Energiespeicher wird, wie bereits in Abschnitt 2.1 erläutert, bei einem Brennstoffzellenhybridsystem für verschiedene Aufgaben benötigt. In diesem Kapitel werden die Kennwerte von Energiespeichern vorgestellt und es wird auf die Besonderheiten der verschiedenen Batterietypen eingegangen. Anschließend werden die Kenndaten der Batterien hinsichtlich spezifischer Energie und Leistung und Kosten miteinander verglichen.

### 2.4.1 Kennwerte von Energiespeichern

Die mittlere Spannung, die sich bei Normbedingungen während der Entladung einstellt, wird als Nennspannung  $U_N$  bezeichnet. Die bei der Entladung mit dem Nennstrom  $I_N$  und bei der Nenntemperatur entnehmbare Ladungsmenge einer voll geladenen Batterie wird als Nennkapazität  $K_N$  bezeichnet. Wie hoch die Kapazität wirklich ist, hängt von der Vorgeschichte, der Batterietemperatur und dem Entladestrom ab. Die Spannung der Batterie hängt vom Ladezustand der Batterie und der Stromstärke ab. Die in der Batterie gespeicherte Ladungsmenge bezogen auf die Kapazität wird durch den Ladezustand SOC ("state of charge") angegeben. Dieser kann aus der Ladungsbilanz seit der letzten Vollladung der Batterie und der Kapazität der Batterie nach Gleichung 2.13 berechnet werden. [26, S.206] .

$$SOC = 1 - \frac{Q_b}{K_N} \quad (2.13)$$

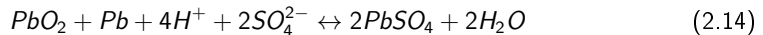
In dieser Gleichung entspricht  $Q_b$  in Gleichung 2.13 der Ladungsbilanz seit dem letzten Vollladestand und  $K_N$  wie oben erwähnt der Nennkapazität der Batterie. Eine vollständig geladene Batterie hat einen Ladezustand von 100 %, während eine komplett entladene Batterie einen Ladezustand von 0 % aufweist. Eine für die Entladung der Batterie aussagekräftige Größe ist die Entladetiefe. Die Entladetiefe gibt den Anteil der während der Entladung entnommenen Kapazität an.

Die Stromstärke wird üblicherweise durch die Verwendung der C-Rate angegeben. Diese bezieht den Strom [A] auf die Nennkapazität der Batterie [Ah]. Eine Entladung mit einer C-Rate von eins bedeutet, dass eine voll geladene Batterie innerhalb von einer Stunde komplett entladen ist. Höhere C-Raten führen zu einer schnelleren Entladung. Es hängt vom Batterietyp ab, welche C-Raten verwendet werden können. Der Strom-Spannungsverlauf hängt bei Batterien hauptsächlich von der offenen Zellspannung und dem Innenwiderstand ab. Die Aktivierungsüberspannung ist in der Regel vernachlässigbar.

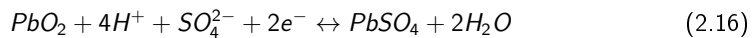
## 2.4.2 Batterietypen

Aktuell gibt es drei verschiedene Grundtypen von Batterien, die für die mobile Anwendung in Betracht kommen. Diese Batterietypen sind Blei-, Nickelmetallhydrid und Lithium-Ionen-Batterien. Diese Batterien unterscheiden sich hinsichtlich der verwendeten Elektroden und Elektrolytmaterialien.

Die negative Elektrode der Bleibatterie besteht im geladenen Zustand aus metallischem Blei und die positive aus Bleidioxid. Die Reaktionsgleichung beim Laden und Entladen der Batterie ist in Gleichung 2.14 dargestellt.



Bei der Entladung der Batterie läuft die Reaktion von links nach rechts ab. Somit werden bei der Entladung der Batterie Blei, Bleidioxid, Wasserstoffprotonen und Sulfationen in Wasser und Bleisulfat umgewandelt. An den einzelnen Elektroden laufen die Reaktionen gemäß den Gleichungen 2.15 und 2.16 ab. An der negativen Elektrode gibt das metallische Blei zwei Elektronen ab und reagiert mit dem Sulfation zu Bleisulfat, welches sich an der Elektrode abscheidet. An der positiven Elektrode gibt das Bleidioxid zwei Sauerstoffatome ab und reagiert mit einem Sulfation zu Bleisulfat. Die Sauerstoffionen reagieren mit den Wasserstoffprotonen und den Elektronen zu Wasser. Beim Laden der Batterie verlaufen diese Reaktionen in umgekehrter Richtung.

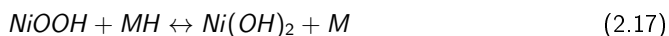


Ein Hauptalterungsmechanismus bei Bleibatterien ist die Sulfatisierung. Das während der Entladung der Batterie entstehende Bleisulfat ist ein elektrischer Nichtleiter. Die kleinen Bleisulfat-Kristalle, die beim Entladen der Batterie entstehen, werden beim Laden wieder aufgelöst. Die Lösungs- und Fällungsvorgänge finden an der Oberfläche statt. Es entstehen mit der Zeit immer größere Kristalle, die bei einem vollständigen Laden der Batterie zunächst wieder aufgelöst werden können. Übersteigt die Kristallgröße jedoch einen Wert von  $10 \mu\text{m}$  können sie nur schwer wieder aufgelöst werden. Um diesen Effekt zu vermeiden, müssen Bleibatterien regelmäßig vollständig aufgeladen und Tiefentladungen vermieden werden [20, S. 54].

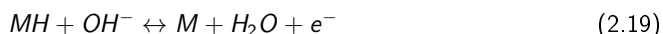
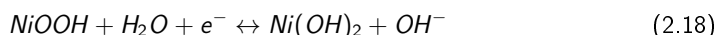
Die als Starterbatterien eingesetzten Bleibatterien in konventionellen Autos arbeiten bei einem Ladezustand von über 90 % und einer Endladetiefe von 5 %. Bei diesen Bedingungen stellt die Sulfatisierung kein Problem dar. Bei Ladezuständen zwischen 30 % und 80 % läuft die Sulfatisierung sehr schnell ab. Deshalb ist die Bleibatterie laut [21, S. 25] untauglich für Hybridanwendungen. Eine Möglichkeit die Leistung der Batterie zu erhöhen ist es, sie mit einem Superkondensator zu verschalten. Eine interne Verschaltung dieser Komponenten ist in der so genannten Ultrabatterie realisiert. Dabei ist die negative Elektrode in eine Bleielektrode für die Batterie und eine Kohlenstoffelektrode für den Kondensator aufgeteilt. Beide teilen sich

die negative Bleidioxid-Elektrode. Die Leistungsbereitstellung ist nach [22] im Vergleich zur reinen Bleibatterie um 50 % bis 60 % höher. Die Lebensdauer der Batterie soll durch diese Verschaltung ebenfalls erhöht werden. Der Doppelschichtkondensator wirkt in diesem Fall als Dämpfer. Die geringe Entladetiefe bleibt jedoch weiterhin ein Problem dieses Batterietyps.

Die Nickelmetallhydridbatterie ist eine alkalische Batterie. Bei der Entladung reagiert Nickeloxidhydroxid mit dem in einem Metallhydrid gespeicherten Wasserstoff zu Nickelhydroxid. Bei dieser Batterie wird zwischen den beiden Elektroden Wasserstoff übergeben.

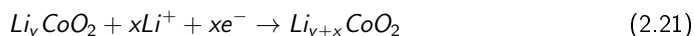
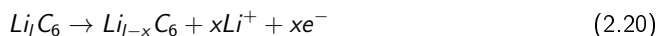


Die positive Elektrode besteht im geladenen Zustand aus Nickeloxidhydroxid. Dieses reagiert mit Wasser und einem Elektron zu Nickelhydroxid und einem Hydroxidion entsprechend Gleichung 2.18. An der negativen Elektrode reagiert der im Metallhydrid gespeicherte Wasserstoff mit einem Hydroxidion zur Wasser und einem Elektron. Der wässrige Elektrolyt dient zur Protonenleitung und nimmt an der Reaktion nicht teil.



In [20, S. 78] wird angegeben, dass sich in der Regel die Reaktions- und Absorptionswärme ausgleichen und dass der ausbleibende Kühleffekt die Ladeströme auf eine C-Rate von 1 begrenzen. Dies ist direkt mit einer guten Hochstromfähigkeit bei der Entladung verknüpft, da es hier nicht zu einer zusätzlichen Erwärmung durch die Reaktionswärme kommt.

Die Energiespeicherung in der Lithium-Ionen-Batterie basiert auf dem Prozess der Interkalation. Die Lithiumatome werden als Gastatome in den Wirtsgittern der Elektroden gespeichert. Die im Graphit gespeicherten Lithiumatome wandern bei der Entladung durch den Elektrolyt von der negativen Elektrode zur positiven Elektrode. An der positiven Elektrode reagiert das Lithiumion zusammen mit Elektronen und dem Elektrodenmaterial. Die ablaufenden Reaktionen an der negativen (Gl. 2.20) und der positiven Elektrode (Gl. 2.21) sind beispielhaft für Graphit und Lithiumcobaltoxid gezeigt. [20, S. 104]



In Lithiumzellen laufen nach [20] keine reversiblen chemischen Nebenreaktionen ab. Eine Überladung führt somit zu einer Schädigung der Zelle. Aus diesem Grund muss die Spannung kontrolliert und der Ladevorgang zeitlich begrenzt werden.

### 2.4.3 Einordnung der Batterien

Die spezifischen Energie- und Leistungswerte der verschiedenen Batterietypen sind in einem Ragone-Diagramm (siehe Abb. 2.5) dargestellt. Die höchsten Energie- und Leistungswerte erreicht die Lithium-Ionen-Batterie. Bei diesem Batterietyp gibt es eine große Variationsbreite hinsichtlich der Energie- und Leistungswerte. Eine Hochenergiebatterie erreicht mit bis zu 180 Wh/kg die doppelte spezifische Energie wie eine Hochleistungsbatterie bei einer um zwei Größenordnungen kleineren Leistung. Die NiMH und die Bleibatterie weisen deutlich geringere Energie- und Leistungswerte auf.

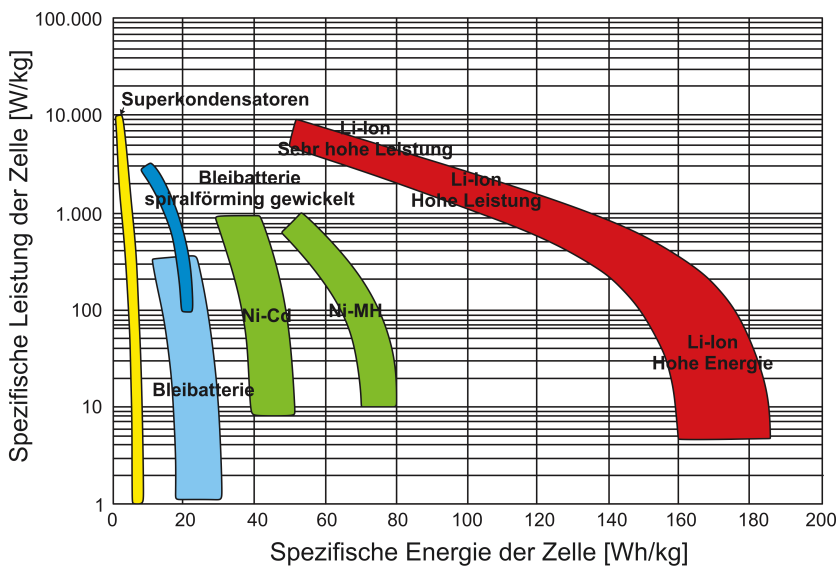


Abb. 2.5: Ragone Diagramm für Sekundärbatterien nach [23]

Von Eckstein und Gnörich [24] wurden spezifische Kosten für die verschiedenen Energiespeicher berechnet. Die Bleibatterie kommt durch die geringe mögliche Entladetiefe (DOD) von 5 % auf spezifische Kosten von 200 €/kW und 2 €/Wh. Die NiMH-Batterie weist bei einem angenommenen DOD von 50 % Kosten von 40 €/kW und 1,5 €/Wh auf. Bei der Lithium-Ionen-Batterie hängen die Kosten stark von der Bauart ab. Die Hochleistungsbatterie weist Kosten von etwa 20 €/kW und 1 €/Wh auf. Bei der Hochenergiebatterie sinken die energiebezogenen Kosten, wobei die leistungsbezogenen Kosten auf etwa 260 €/kW ansteigen. Bei hohen Leistungsanforderungen weisen die Superkondensatoren die geringsten Kosten auf.

Die Lithium-Ionen-Batterie ist für die Anwendung in einem Brennstoffzellen-Hybridsystem sowohl hinsichtlich ihrer Kenndaten, als auch der Kosten vorteilhaft. Sie wird daher für die Anwendung der Bordstromversorgung ausgewählt.



## 3 Stand der Technik und Forschung

In diesem Kapitel wird der Stand der Technik und Forschung vorgestellt. Zuerst wird auf den Stand der Reaktor- und Systementwicklung am IEK-3 eingegangen. Weiterhin wird auf die bisher durchgeführten Arbeiten im Institut zur strömungsdynamischen Simulationen, zum Anfahrvorgang und zum Packaging eingegangen. Im Anschluss daran folgt ein globaler Literaturüberblick zu den Themen Brennstoffzellenhybridsysteme, Anfahrstrategien und Packaging. Am Ende des Kapitels werden aus den bisherigen Arbeiten und den Anforderungen an ein Brennstoffzellensystem die Schwerpunkte der Arbeit abgeleitet.

### 3.1 Reaktor- und Systementwicklung am IEK-3

Es werden die existierenden Reaktoren, sowie aktuelle Ergebnisse vorgestellt. Weiterhin wird der Einfluss der strömungsdynamischen Simulationen auf die Reaktorentwicklung beleuchtet. Im Anschluss daran werden die bisherigen Arbeiten bei der Systementwicklung vorgestellt.

#### 3.1.1 Reaktorentwicklung

Die Kernkomponenten der Brenngaserzeugung sind in Abbildung 3.1 abgebildet. Die Funktionsweise dieser Reaktoren wird im folgenden Abschnitt erläutert. Bei dem linken Reaktor handelt es sich um den autothermen Reformer ATR 9.2, in der Mitte der zweistufige Wassergasshiftreaktor WGS 4 und rechts der Katalytbrenner KB 3.



Abb. 3.1: Reaktoren der Brenngaserzeugung (links: Autothermer Reformer ATR 9.2; Mitte: Wassergasshiftreaktor WGS 4; rechts: Katalytbrenner KB 3)



Die Funktionsweise dieser Reaktoren ist in Abbildung 3.2 skizziert. Der links abgebildete Reaktor ist der autotherme Reformer (ATR). Bei diesem wird Kraftstoff in einen Wasserdampfstrom eingedüst und anschließend mit Luft gemischt. Der Kraftstoff muss durch die Energie des Wasserdampfs verdampft werden. Die Luft wird kalt zugegeben. Nach der Mischkammer existiert eine kurze Strecke zur Homogenisierung des Gemischs. Die katalytische Reformierungsreaktion findet in einem Monolithen statt. Bei dieser Reaktion wird mehr Wärme produziert als verbraucht wird. Das Reformat wird durch eine Umleitung am Monolithen entlang geführt und strömt danach um einen Rohrwendelwärmeübertrager. Das Reformat soll in diesem Wärmeübertrager auf 400 °C abgekühlt werden und das Wasser soll innerhalb der Rohrwendel verdampft und überhitzt werden.

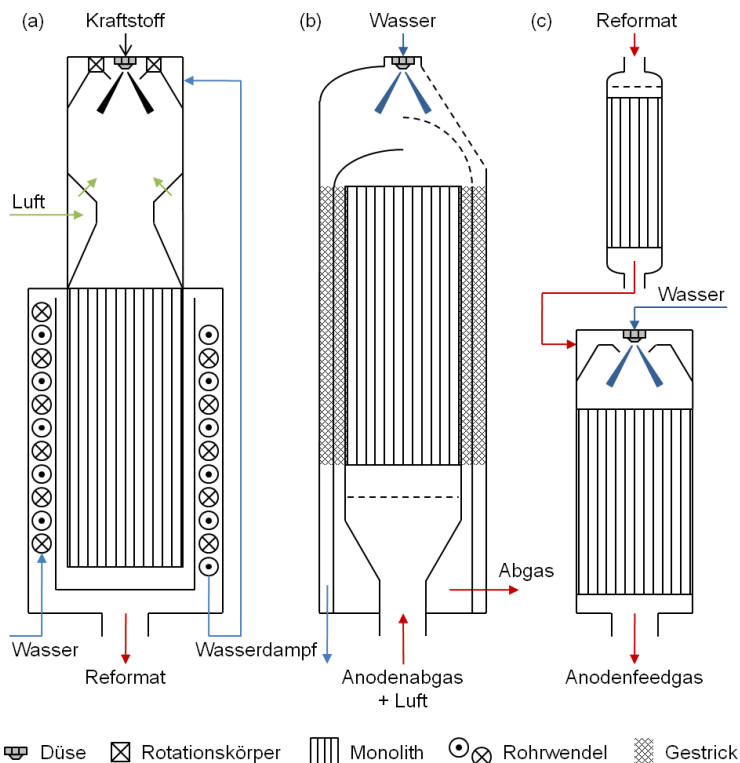


Abb. 3.2: Reaktoren der Brenngaserzeugung: Autothermer Reformer, Katalytbrenner und Wassergasshiftreaktor [25] (von links nach rechts)

Der mittlere Reaktor in Abbildung 3.2 stellt einen katalytischen Brenner dar. In diesem wird eine Mischung aus Anodenabgas und Luft geleitet. Dieses Gemisch wird in einem Monolithen katalytisch umgewandelt. Im Gegensatz zum autothermen Reformer wird dieser Reaktor überstöchiometrisch betrieben, wodurch es zu einer vollständigen Oxidation von Wasserstoff, Kohlenmonoxid, Methan und der restlichen Kohlenwasserstoffe kommt. Die bei dieser Reaktion

freiwerdende Reaktionswärme wird genutzt, um Wasser, welches auf einen Klöpperboden aufgedüst wird, zu verdampfen. Der entstehende Wasserdampf wird dem autothermen Reformer zugeführt. Auf der rechten Seite der Abbildung 3.2 ist der Wassergasshiftreaktor abgebildet. Dieser Reaktor wird bei Niedertemperaturbrennstoffzellen benötigt, um den Kohlenmonoxidgehalt im Produktgas zu reduzieren. Dieser Reaktor ist, wie bereits diskutiert, zweistufig ausgeführt. In die Hochtemperaturstufe gelangt das Reformat mit einer Temperatur von ungefähr 400 °C. Das im Reformat enthaltene Kohlenmonoxid reagiert mit dem im Reformat enthaltenen Wasserdampf. In der Niedertemperaturstufe wird das Gasgemisch durch Eindüsen von kaltem Wasser auf etwa 250 °C abgekühlt. Der Kohlenmonoxidanteil im Produktgas wurde in [26] für einen weiten Bereich der HTS-Eintrittstemperaturen und der Wasserzugabe bestimmt. Es konnten Kohlenmonoxidwerte von deutlich unter 1 Vol-% im feuchten Gas bestimmt werden.

Mit dem Reformer ATR 9.2 wurde von Pasel et al. [27] ein Langzeittest mit aus Erdgas hergestelltem Kerosin (GtL-Kerosin) und aus Biomasse hergestelltem Diesel (BtL-Diesel) durchgeführt. Bei diesem Langzeittest wurde der Reformer zuerst für 5000 Stunden mit GtL-Kerosin betrieben. Der Umsatz der Kohlenwasserstoffe betrug bei diesem aus Erdgas hergestellten Kerosin 99,996 % nach 5000 Betriebsstunden [28]. Nach einem Wechsel zu einem aus Biomasse hergestellten Dieselmotorkraftstoff (BtL-Diesel) und weiteren 1000 Betriebsstunden betrug der Umsatz der Kohlenwasserstoffe weiterhin 99,67 % [27]. Dieser Versuch wurde bis zu einer Gesamtlaufzeit von 10000 Stunden durchgeführt. Der Kohlenwasserstoffumsatz betrug am Ende der Versuche mehr als 98 % [28]. Der Katalytbrenner KB 3 ist eine hochskalierte Version des KB 2. Er ist für eine Leistung von 6,5  $kW_{th}$  ausgelegt. Die Strömungsführung wurde für einen optimierten Wärmeübergang ausgelegt. Mit diesem katalytischen Brenner wurde eine pulsationsfreie und kontinuierliche Dampferzeugung gezeigt [29]. Von Meißner et al. [29] wird weiterhin über eine neue Reaktorgeneration, den KB 4 berichtet. Dieser ist eine gewichts- und volumenreduzierte Version für die Anwendung einer LKW-APU. Dieser Reaktor wurde von Meißner et al. [30] getestet. Dieser Brenner kann bereits nach weniger als einer Minute nach der Zündung Dampf für den Reformer bereitstellen. Weiterhin wurde der Start des Katalytbrenners im Reformatbetrieb demonstriert.

#### 3.1.1.1 Strömungsdynamische Modellierung

Die strömungsdynamische Modellierung wird am IEK-3 für die Optimierung der Brenngaserezeugungskomponenten eingesetzt. Von Porš [31] wurden strömungsdynamische Simulationen zur Optimierung der Mischkammer durchgeführt. Das Ziel dieser Optimierung war es, eine optimierte Mischkammer für den Betrieb eines Dieselreformers mit realem Dieselmotorkraftstoff zu konstruieren, um diese langfristig betreiben zu können. Um dieses Ziel zu erreichen, wurden verschiedene Themenstellungen bearbeitet. Ein wichtiges Thema ist die Einspritzung und Zerstäubung des Kraftstoffs und die anschließende vollständige Verdampfung. Ein Problem bei der vollständigen Verdampfung von hoch siedenden Kraftstoffen ist, dass die benötigte Temperatur für die Verdampfung die Zündtemperatur übersteigt [31, S. 36]. Weiterhin sollen sich die Gase zu einem homogenen Gemisch vermischen und kohlenstoffhaltige Ablagerungen vermieden werden. Das Ergebnis der Simulationen war eine Mischkammer, bei der auf die Zwei-

stoffdüse für Kraftstoff und Luft verzichtet werden konnte. Bei dem Konzept des ATR-5, der Ausgangspunkt der Arbeit war, wurde Kraftstoff und Luft durch eine Zweistoffdüse eingedüst. In Strömungsrichtung gesehen weiter abwärts wurde ein Wasserdampf-Luft Gemisch entgegen der Strömungsrichtung zugegeben. Bei der optimierten Mischkammer wird der Kraftstoff durch eine Einstoffdüse eingedüst und ein Wasserdampf-Luftgemisch umströmt die Düse. Die Beigabe des Hauptanteils der Luft erfolgt erst am Ende der Mischkammer. Dieses Konzept wurde zum Patent angemeldet [32]. Es zeichnet sich durch einen geringeren Druckverlust der Luft und die Vermeidung der kohlenstoffhaltigen Ablagerungen aus. Mit einem durch Visualisierungsexperimente validierten CFD-Modell wurden verschiedene Entwürfe der Mischkammer berechnet und basierend darauf die Reaktoren ATR 7 und ATR 8 konstruiert und gefertigt.

Ausgehend von diesem Mischkammerkonzept wendete Scharf [25] die CFD-Methodik an, um die Reaktoren der Brenngaserzeugung zu optimieren. Es wurde auf die Modellierung der Eindüsen, der chemischen Reaktionen und der Wärmeübertragung in den Reaktoren näher eingegangen. Bei der Eindüsung lag der Fokus auf der Modellierung weit modulierbarer Einspritzsysteme. Bei der Modellierung der Wärmeübertragung wurde der Fokus auf die Modellierung der Wärmeübertragung bei der Verdampfung von Wasser gelegt. Weiterhin wurde eine Methodik zur zweidimensionalen Berechnung von Wärmeübertragern in strömungsdynamischen Simulationen entwickelt [25, S. 144]. Die Geometrie und die Randbedingungen dieser Methodik sind in Abbildung 3.3 abgebildet. Diese Methodik wurde mit dem Ziel, nichtrotationssymmetrische Bauteile in einer zweidimensionalen Simulation modellieren zu können, entwickelt. Bei der Geometrieerstellung einer Rohrwendel werden die einzelnen Windungen als voneinander getrennte Rohrringe abgebildet. Das Modell liest die Wärmeströme durch die Rohrwand aus der Fluent-Berechnung aus. Ausgehend von diesem ausgelesenen Wärmestrom, der Eintrittstemperatur des Mediums und Stoffwerten wird die Temperatur in der Rohrwendel berechnet. Diese dient dann jeweils als Eintrittstemperatur der nächsten Rohrwendelwindung. Die berechneten Temperaturen und der berechnete Wärmeübergangskoeffizient  $\alpha$  werden an die Fluent-Berechnung übergeben. Dieses iterative Verfahren ist nach [25] aufgrund der geringeren Genauigkeit nur zur Konzeptvalidierung und -optimierung geeignet.

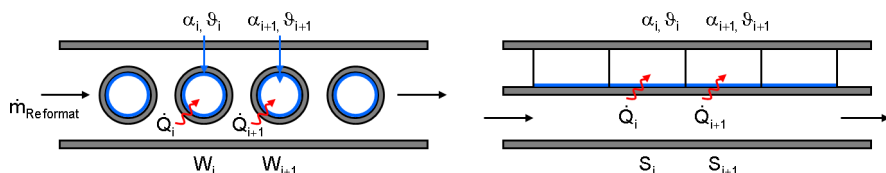


Abb. 3.3: Iterative Methodik zur vereinfachten 2D Modellierung von Rohrwendel- (links) und Ringspaltwärmetauschern (rechts). [25]

Mit der entwickelten Gesamtmethodik wurde der Reformer ATR 12 in einem 30 ° und einem 60 °-Modell simuliert. In diesen Modellen wurden die Eindüsung und Verdampfung des Kraftstoff und des Wassers, die chemischen Reaktionen und die Wärmeübertragung im inte-

grierten Wärmeübertrager berücksichtigt. Diese Arbeiten bilden den Ausgangspunkt für die strömungsdynamischen Simulationen im Rahmen dieser Arbeit.

### 3.1.2 Systementwicklung

Aus den Brenngaserzeugungskomponenten und der HT-PEFC wurde am IEK-3 ein Prototypensystem entwickelt. Die Verschaltung dieses Brennstoffzellensystems ist in Abbildung 3.4 aufgezeichnet. Im stationären Zustand wird Dieselkraftstoff im autothermen Reformer (ATR) in einen Wasserdampfstrom eingedüst und dadurch verdampft. Diesem Kraftstoffwassergemisch wird Luft zugefügt, bevor es durch den Katalysatormonolithen strömt. In diesem findet die katalytische Umwandlung des Kraftstoffs statt. Eine Auswahl der gewünschten Bruttoreaktionsgleichungen ist in Kapitel 2.3 beschrieben. Das wasserstoffreiche Produktgas strömt nach dem Austritt aus dem Monolithen durch einen internen Wärmeübertrager, wo ein Teil der Wärme an den benötigten Wasserdampf übertragen wird. Die beiden abgebildeten Heizpatronen werden ausschließlich während des Startvorgangs verwendet und sind bei einem stationären Betrieb des Systems ausgeschaltet.

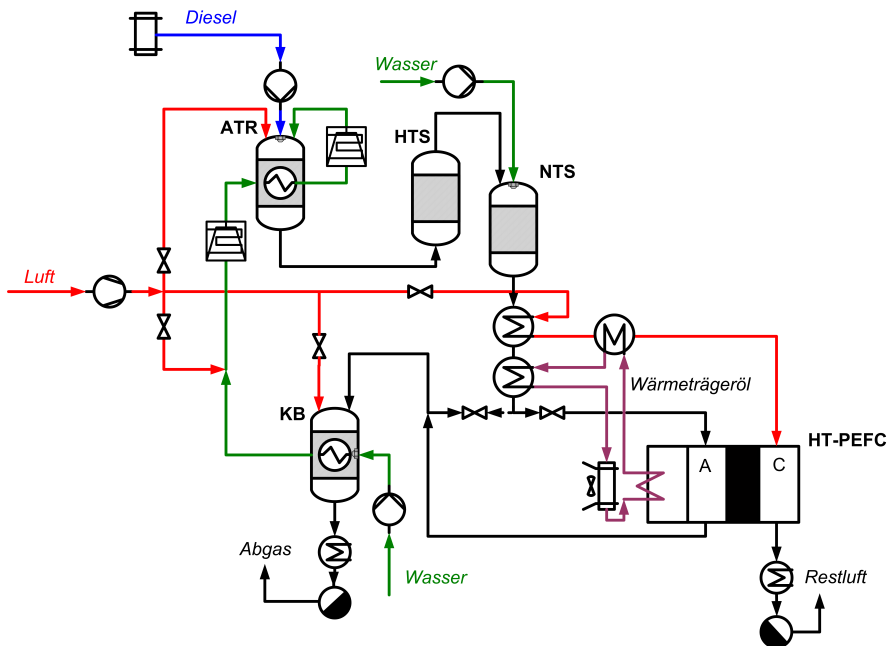


Abb. 3.4: Verschaltung des HT-PEFC-Systems im Teststand

Das Reformat strömt nach dem Reformer durch einen zweistufigen Wassergasshiftreaktor, indem der Stoffmengenanteil von Wasserstoff erhöht und der Kohlenmonoxidanteil reduziert wird. Das Reformat strömt danach durch einen Reformat-Luft-Wärmeübertrager und einen

Reformat-Öl Wärmeübertrager und danach in die Brennstoffzelle. Das Reformat wird so in dem ersten Wärmeübertrager herunter gekühlt und mit der übertragenen Wärme wird Luft für die Brennstoffzelle aufgeheizt. Sowohl das Reformat, als auch die Luft strömen danach durch jeweils einen Wärmeübertrager mit Öl als zweites Fluid im Wärmeübertrager, wodurch sich die Temperatur der Gase an die Temperatur des Wärmeträgeröls annähert. Im stationären Betrieb strömt das Reformat in die Anodenseite der Brennstoffzelle und wird dort umgewandelt. Die Funktionsweise der Brennstoffzelle wurde in Kapitel 2.2 erläutert. Die für die Reaktion auf der Kathodenseite benötigte Luft strömt durch die beiden erwähnten Wärmeübertrager vorgewärmt in die Brennstoffzelle und der Sauerstoff wird an der Elektrode umgewandelt. Die restliche Luft strömt zusammen mit dem produzierten Wasser aus der Brennstoffzelle heraus und das Wasser wird zur Schließung der Wasserbilanz auskondensiert. Das nicht umgesetzte Reformat, auch als Anodenrestgas bezeichnet, strömt anschließend in den katalytischen Brenner, wo die brennbaren Gase unter Zugabe von Luft katalytisch vollständig oxidiert werden. Die entstehende Reaktionswärme wird in einem integrierten Wärmeübertrager genutzt, um Wasser zu erwärmen, zu verdampfen und zu überhitzen. Der im Katalytbrenner (KB) erzeugte Wasserdampf wird anschließend mit flüssigem Wasser vermischt, um Nassdampf zu erzeugen, welcher in den Reformer geleitet wird. Dieser wird dann im Reformer auf die benötigte Temperatur von 400 °C überhitzt. Von Samsun et al. [33] wurden Experimente mit diesem System durchgeführt. Das System konnte mit synthetischen Diesel- und Kerosinkraftstoffen sowie mit einem kommerziellen Dieselkraftstoff betrieben werden. Aufgrund der limitierten Teillastfähigkeit des Reformers musste dieser bei der Reduzierung der Leistung mit konstanten Durchflüssen betrieben werden. Der Katalytbrenner wurde bei diesem Test in Teillast betrieben. Der Betrieb des gekoppelten Systems konnte erfolgreich demonstriert werden. Der Wirkungsgrad dieses ersten Prototyps ergab sich am Auslegungspunkt von 5 kW zu 24 % [34].

Dieses System dient als Ausgangspunkt für die Optimierungen im Rahmen dieser Arbeit. Auf die bisherigen Arbeiten im Bereich des Startvorgangs und des Packagings wird in den nächsten Abschnitten eingegangen.

### 3.1.2.1 Startstrategie

Die aktuelle Anfahrstrategie basiert auf der Vermeidung von flüssigem Wasser im System. Alle Brenngaserzeugungskomponenten müssen auf eine Temperatur oberhalb des Taupunktes von Wasser aufgeheizt werden, bevor die Zufuhr von Wasserdampf starten kann. Das System soll mit einem maximalen absoluten Druck von 2 bar betrieben werden. Aus diesem Druck ergibt sich eine benötigte Temperatur von 120 °C. Ab dem Zeitpunkt, zu dem diese Temperatur erreicht ist, kann die Zufuhr von Wasserdampf starten. Der Monolith im Reformer muss weiterhin auf eine Temperatur von 320 °C aufgeheizt werden, damit die Reaktion startet. Ein Ablaufschema für den Anfahrvorgang des HT-PEFC-Systems ist in [18, S. 141] dargestellt. Zu Beginn des Startvorgangs wird, je nach Systemdesign, ein Startbrenner oder eine Heizpatrone in Betrieb genommen. Durch die entstehende Wärme wird zuerst Luft erhitzt und nach dem Überschreiten des Taupunktes kann Wasser verdampft und dem System zugegeben werden. Bei einer Wasserdampftemperatur von 400 °C und einer Monolithtemperatur von über 320 °C

ist der Reformer zündbereit und es wird Kraftstoff in den Reformer eingedüst. Kurz darauf wird der Katalytbrenner in Betrieb genommen und das erzeugte Brenngas wird katalytisch oxidiert. Die Wasserzugabe in den Niedertemperatur-Wassergasshiftreaktor startet, sobald das Reformat eine Temperatur von 400 °C erreicht hat. Das Reformat strömt so lange durch den Bypass an der Brennstoffzelle vorbei, bis die Kohlenmonoxidkonzentration auf einen Wert von maximal 1 Vol.-% reduziert wurde und die Brennstoffzelle eine Temperatur von mindestens 140 °C erreicht hat. Die für den Startvorgang benötigte Komponente wird ausgeschaltet, wenn die im Katalytbrenner produzierte Wasserdampfmenge für den Betrieb des Reformers ausreicht.

Von Samsun [18] wurden verschiedene Möglichkeiten der Aufheizung betrachtet. Es wurde die Aufheizung mittels Heizpatronen und die indirekte Aufheizung mittels eines Startbrenners untersucht. Die Simulationsergebnisse [18, S. 152] zeigen, dass sich die Verwendung eines Startbrenners positiv auf das Startverhalten des Systems auswirken kann. Bei der Verwendung des Startbrenners ist sowohl die Aufheizzeit, als auch die benötigte Energiemenge im Vergleich zur Aufheizung durch eine Heizpatrone minimal. In einer Diplomarbeit [35] wurden diese beiden Konzepte näher untersucht. Die kürzeste Aufheizzeit wurde für das Brenngaserzeugungssystem mit einer Aufheizleistung von 24 kW zu 335 Sekunden simuliert.

Das Konzept der Aufheizung durch einen Startbrenner wurde in einer Dissertation [26] weiter verfolgt. Der in dieser Arbeit favorisierte Systemaufbau ist in Abbildung 3.5 dargestellt. Die beiden Heizpatronen, die im Teststandsaufbau integriert sind, wurden in dieser Verschaltung durch einen Startbrenner mit integriertem Wärmeübertrager ersetzt.

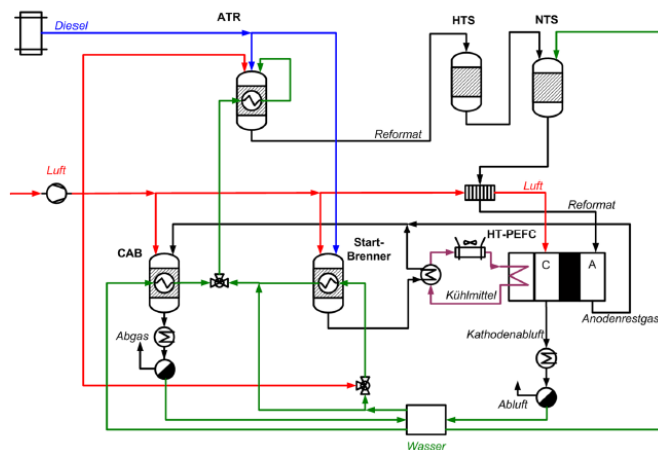


Abb. 3.5: Verschaltung des Brennstoffzellensystems [26]

Nach diesem Konzept wird zu Beginn des Startvorgangs der Startbrenner in Betrieb genommen und das heiße Abgas erwärmt zuerst in einem internen Wärmeübertrager Luft, die dann

durch den Reformer strömt und seriell alle Komponenten aufwärmt. Das Abgas des Startbrenners strömt anschließend durch einen weiteren Wärmeübertrager in dem Wärmeträgeröl für den Stack erwärmt wird. Nach der Überschreitung des Taupunkts in allen Reaktoren wird im Startbrenner Wasser verdampft und ins System geleitet. Nachdem der Reformer gezündet ist und der Katalytbrenner Wasserdampf produziert, kann der Startbrenner ausgeschaltet werden. Die Funktionsweise im stationären Zustand entspricht der bereits beschriebenen Funktionsweise des Systems im Teststand. In der Dissertation von Wiethage [26, S. 27] wurde eine Marktanalyse zu Diesel- und Kerosinbrennern durchgeführt und ein Brenner der Firma Physitron mit einer regelbaren Leistung zwischen  $3 \text{ kW}_{th}$  und  $27 \text{ kW}_{th}$  ausgewählt. Mit dem Startbrenner wurden Versuche hinsichtlich der Steuerung und der eingestellten Leistung durchgeführt.

In den bisherigen Arbeiten wurde gezeigt, dass sich der Einsatz eines Startbrenners positiv auf den Systemstart auswirken kann. Es wurde weiterhin eine Marktanalyse über Startbrenner durchgeführt und ein passender Startbrenner getestet. Dynamische Simulationen von [26] haben gezeigt, dass ein Systemstart in 600 Sekunden prinzipiell möglich ist. Um dieses Konzept in die Realität umzusetzen, muss ein Wärmeübertrager entwickelt werden, der in der Lage ist, die Leistung zu übertragen und die geforderten Temperaturen von  $1050 \text{ }^{\circ}\text{C}$  tolerieren kann. Der Reformer muss bei diesem Ansatz auf eine Eintrittstemperatur von  $900 \text{ }^{\circ}\text{C}$  ausgelegt werden. Die Temperaturgrenzen bei dem entwickelten Konzept liegen deutlich über den Grenzen, die das aktuelle System toleriert. Der Startbrenner sollte dann so auf den Betrieb mit dem Wärmeübertrager abgestimmt werden, dass die Temperatur in dem nachfolgenden Wärmeübertrager niedrig genug ist, um hier möglichst günstige Wärmeübertrager einsetzen zu können. Für diesen angepassten Fall muss dann der Startbrenner erneut getestet werden. Weiterhin ist es notwendig, das Aufheizverhalten der einzelnen Komponenten mittels CFD-Simulationen zu simulieren, um Rückschlüsse auf die kritischen Stellen zu erhalten.

#### 3.1.2.2 Brenngaserzeugungspackages

Um das System möglichst kompakt bauen zu können, werden die einzelnen Komponenten zu einem Package zusammengefügt. Ein Ziel ist es, ein System mit einem möglichst geringen Gewicht und einem möglichst geringen Volumen zu bauen. Das Volumen und das Gewicht des Katalysators sind durch die Leistung des Systems und die Kenndaten des Katalysators vorgegeben. Die Reaktoren müssen auf einen möglichst kleinen Bauraum und geringen Druckverlust hin ausgelegt werden. Bei einer leichteren und kompakteren Bauweise sollte deshalb bei der Verwendung des gleichen Katalysators der Volumen- und der Gewichtsanteil des Katalysators zunehmen. Das zweite Jülicher Brenngaserzeugungspackages ist in den Abbildungen 3.6 mit seinen Leistungsdaten dargestellt. Von Wiethage [26] wurde eine Untersuchung hinsichtlich der Gewichts- und Volumenanteile der verschiedenen Komponenten für Package 1 und 2 durchgeführt. Das Package 1 ist für eine elektrische Leistung von  $5 \text{ kW}$  ausgelegt. So kommen die Kernkomponenten der Brenngaserzeugung beim Package 1 auf einen Gewichtsanteil von  $36 \text{ } \%$  und einen Volumenanteil von  $2 \text{ } \%$ . Die Rohrleitungen und die Isolierung nehmen jeweils  $23 \text{ } \%$  des Gewichts ein. Bei der Auftragung der Volumenanteile wird deutlich, dass es sich nur um eine erste Zusammenstellung handelt.  $92 \text{ } \%$  des Volumens sind ungenutzt und  $6 \text{ } \%$  entfallen

auf die Isolierung. Das Package 1 kommt auf einen relativ hohen Wert für die spezifische Leistungsdichte mit 115 W/kg, aber auf eine sehr geringe volumetrische Leistungsdichte von 9 W/l.

Das zweite Jülicher Brenngaserzeugungspackage besitzt die doppelte Nennleistung von Package 1. Bei diesem Package wurden bereits Vorschläge aus einer Diplomarbeit [35] zur Erhöhung der volumetrischen Leistungsdichte berücksichtigt. Somit konnte der Volumenanteil des Leerraums hier auf 14 % reduziert werden. Aufgrund der unterschiedlichen Leistung zwischen Package 1 und Package 2 sind diese Werte jedoch nicht direkt miteinander vergleichbar.

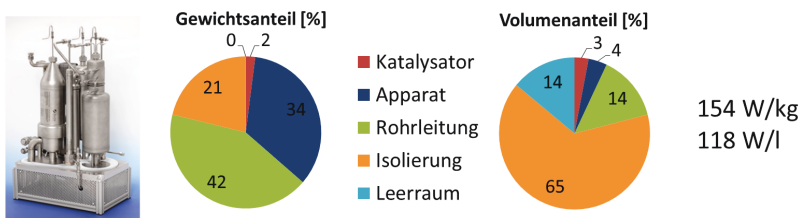


Abb. 3.6: Jülicher Brenngaserzeugungspackage 2 (links: Foto; Mitte: Gewichts- und Volumenanteile; rechts: Leistungsdichten). Daten aus [26] (10 kW<sub>el</sub>-Leistungsklasse)

Die Isolierung nimmt mit 65 % den größten Anteil des Volumens ein, gefolgt von den Rohrleitungen und dem Leerraum mit jeweils 14 %. Die Reaktoren der Brenngaserzeugung zusammen mit den Katalysatoren nehmen weiterhin nur einen kleinen Teil des Volumens ein. Die Isolierung des Systems ist notwendig, um die Wärmeverluste an die Umgebung zu minimieren. Eine weitere Volumenreduktion der Isolierung ist nur möglich, wenn bessere Isolierungsmaterialien verwendet werden oder die Komponenten dichter verschaltet werden und zusammen isoliert werden können. Beim Package 2 beträgt der Massenanteil der Kernkomponenten 36 %. Der Gewichtsanteil der Apparate ist mit 34 % deutlich höher wie der der Monolithen. Den größten Anteil des Gewichts machen die Rohrleitungen mit ihren Isolierungen aus. Sie sind für 42 % des Gewichts verantwortlich. Der Gewichtsanteil der Isolierung ist mit 21 % in etwa so groß wie beim Package 1.

In [26] wurde ein neues Packagekonzept entworfen und durch zweidimensionale strömungsdynamische Simulationen berechnet. Der Aufbau dieses Packages ist in Abbildung 3.7 skizziert. Bei diesem Konzept wurde die durch CFD-Simulationen optimierte Mischkammer übernommen. An die Mischkammer schließt sich der Monolith an, der von einem integrierten Rohrwendelwärmeübertrager umgeben ist. Diesem Konzept liegt der Gedanke zu Grunde, dass der Leerraum, der sich durch den kleineren Durchmesser der Mischkammer im Vergleich zum integrierten Wärmeübertrager ergibt, durch den WGS ausgenutzt werden soll. Weiterhin wurde um den unteren Teil des Reformers ein Luft-/Reformat-Wärmeübertrager integriert. Die Verbindungskanäle zwischen den Komponenten sind in den Schnittdarstellungen A-A und B-B dargestellt. Das Reformat wird durch einen dieser Kanäle vom NTS in den Reformat/Kathodenluft-Wärmeübertrager geleitet. In diesem Wärmeübertrager wird die Luft vor der Verwendung in



der Brennstoffzelle vorgewärmt. Der andere der beiden Kanäle erstreckt sich über die gesamte Länge des Reformers. In diesem wird der Dampf, der im Rohrwendelwärmeübertrager erzeugt und überhitzt wird zur Spitze des Reformers geleitet, wo er in die Mischkammer geleitet wird.

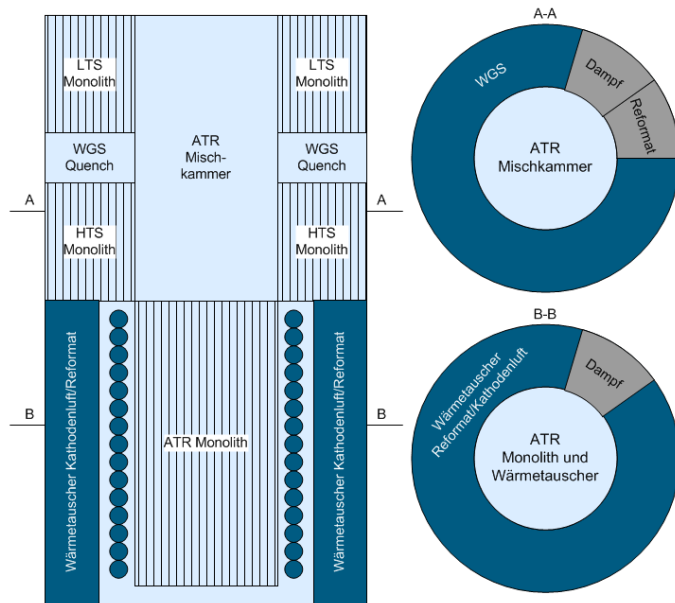


Abb. 3.7: Packagekonzept [26]

Für die Simulation des Packagekonzepts wurden viele vereinfachende Annahmen getroffen. Bei diesen stationären zweidimensionalen Berechnungen wurde von rotationssymmetrischen Bauteilen ausgegangen. Für die einzelnen Reaktionsbereiche wurden feste Temperaturen angenommen und die Temperaturen innerhalb der Rohre wurden entsprechend der berechneten Werte für den Reformer ATR 9.2 aus [25] festgelegt. Für den WGS und den Reformat/Luftwärmeübertrager wurde ein poröser Körper angenommen. Durch diese Annahme wurde dem reduzierten Volumen Rechnung getragen. Die Kanäle und die Ein- und Austritte wurden bei dieser Simulation vernachlässigt.

Bei den bisherigen Packages existiert noch ein Verbesserungspotential hinsichtlich der Gewichts- und Volumenreduzierung, sowie einer Optimierung des Druckverlustes. Das von Wiethege entworfene neue Packagekonzept wurde nur sehr stark vereinfacht modelliert. Weiterhin sind einzelne Bereiche dieses Konzeptes schwer realisierbar. Aus diesem Konzept ergeben sich zwei Arbeitsaufträge. Es muss eine Methodik entwickelt werden, um ganze Packages simulieren zu können und in diese Methodik müssen fertigungstechnische Aspekte mit einfließen.

## 3.2 Hybridsysteme mit Brennstoffzellen

Auf die Notwendigkeit der Erweiterung eines Brennstoffzellensystems zum Hybridsystem wurde in Kapitel 2.1 eingegangen. In diesem Kapitel soll der Stand der Literatur hinsichtlich der verschiedenen Verschaltungsarten und Betriebsweisen näher betrachtet werden.

### 3.2.1 Verschaltungsarten

Wie bereits im Kapitel 2.1 beschrieben gibt es aktive und passive Hybride. Im folgenden Abschnitt wird auf die verschiedenen Verschaltungsarten und die in der Literatur enthaltenen Verbesserungsvorschläge der grundlegenden Verschaltungen eingegangen.

#### 3.2.1.1 Passive Hybridsysteme

Beim passiven Hybridsystem werden die Batterie und die Brennstoffzelle ohne aktive Leistungselektronik miteinander verschaltet. In [36] wird auf die Notwendigkeit eines aktiven Hybridsystems hingewiesen. Bei der direkten Verschaltung von Brennstoffzelle und Batterie müssen Brennstoffzellen- und Batteriespannung so ausgelegt werden, dass die offene Zellspannung der voll geladenen Batterie, der offenen Zellspannung der Brennstoffzelle entspricht. Dies schränkt die Möglichkeiten bei der Dimensionierung ein. Wird das bei der Dimensionierung nicht berücksichtigt, besteht bei einer höheren Brennstoffzellenspannung die Gefahr der Überladung der Batterie. Für den Fall einer niedrigeren Brennstoffzellenspannung ist es nicht möglich die Batterie komplett durch die Brennstoffzelle aufzuladen. Die permanente Verschaltung führt dazu, dass die Brennstoffzelle permanent mit Gasen beaufschlagt werden muss. Der Vorteil dieser Verschaltung ist der einfache Systemaufbau.

In Abbildung 3.8 ist die Spannung für die Brennstoffzelle und die Batterie über dem Strom des Systems aufgetragen. Die Batteriespannung ist einmal für den maximalen und für den minimalen Ladezustand eingezeichnet. Im Folgenden wird dieses Diagramm ausgehend von geringen Strömen diskutiert. Diese Verschaltung führt dazu, dass die Brennstoffzelle bei einer voll geladenen Batterie und einem geringen Leistungsbedarf nur einen geringen Anteil der benötigten Leistung liefert. Die Batterie liefert in diesem Fall eine deutlich höhere Leistung als die Brennstoffzelle (Fall 1). Mit zunehmendem Leistungsbedarf sinkt die Spannung des Systems weiter ab. Die Brennstoffzelle liefert dadurch eine höhere Leistung. Die Leistungsanforderung an die Batterie steigt jedoch auch weiter an, so dass sie weiterhin den größten Anteil des Leistungsbedarfes deckt (Fall 2). Dieses Verhältnis verschiebt sich mit zunehmender Entladung der Batterie in Richtung eines höheren Brennstoffzellenstroms. Die Batterie kann bei diesem Konzept nur mit sehr geringen Strömen geladen werden.

Eine andere mögliche passive Verschaltung ist es die Brennstoffzelle mit einem Spannungsbegrenzer parallel zu schalten. Dieser Spannungsbegrenzer führt dazu, dass der starke Spannungsabfall bei niedrigen Stromdichten unterdrückt wird. Dadurch steigt der Anteil der durch

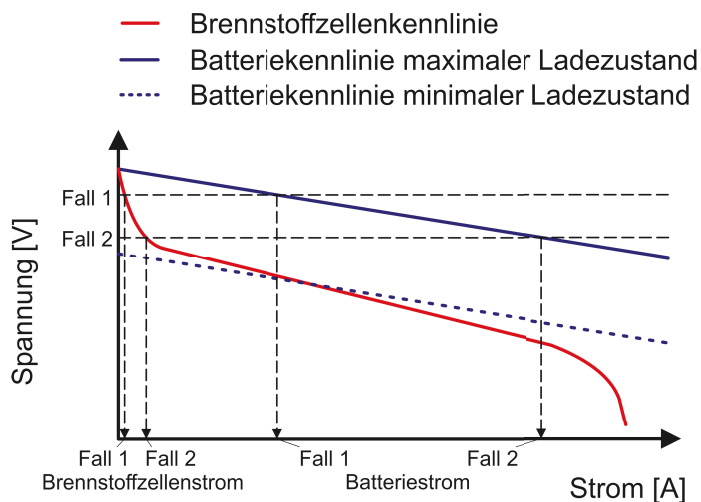


Abb. 3.8: Stromspannungskennlinie nach [36]

die Brennstoffzelle bereitgestellten Leistung sowohl bei geringem, als auch bei hohem Leistungsbedarf. Durch dieses Konzept ist es einfacher möglich die Batterie wieder zu laden und die Brennstoffzelle liefert einen höheren Leistungsanteil. Die Brennstoffzelle kann durch diese Anpassung größer dimensioniert werden. Bei dieser Verschaltung sinkt die Brennstoffzellenleistung ab dem Punkt der maximalen Brennstoffzellenleistung mit zunehmendem Leistungsbedarf ab. Die Batterie muss an diesem Betriebspunkt einen höheren Anteil des Leistungsbedarfs bereitstellen.

Es gibt verschiedene Ansätze, die Nachteile der passiven Hybridisierung aufzuheben. Eine Auswahl dieser Konzepte ist in Abbildung 3.9 dargestellt.

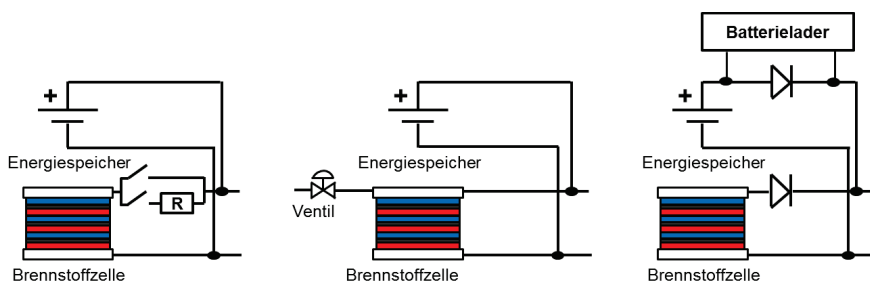


Abb. 3.9: Verschaltungskonzepte für passive Hybride: Verschaltung mittels Schaltern nach [37] (links), Sauerstoffpartialdruckregelung nach [38] (Mitte) und Diodenkonzept nach [39] (rechts)

Ein von Andreasen et al. [37] vorgeschlagenes Konzept ist die Verschaltung mittels Schaltern. Durch die Verwendung von Schaltern ist es möglich, die Brennstoffzelle und die Batterie unabhängig voneinander zu dimensionieren. Die Brennstoffzelle wird nur mit der Batterie verbunden, wenn zusätzliche Energie benötigt wird. Die Verschaltung ermöglicht es, das System mit dem Strom der Batterie zu starten und erst bei Bedarf die Brennstoffzelle zu betreiben. Für ein Brennstoffzellenfahrzeug wurde ein Konzept mit zwei Schaltern verwendet. Bei der Kopplung der Brennstoffzelle wurde zuerst ein Schalter, der mit einem großen Widerstand verbunden ist, geschlossen. Der Widerstand verringert den Einschaltstrompeak. Nach der Kopplung wird dann der Schalter ohne zusätzlichen Widerstand geschlossen, damit möglichst geringe Verluste auftreten. Für Brennstoffzellen, die mit reinem Wasserstoff betrieben werden, wurde von Bernard et al. [38] ein weiteres Konzept vorgestellt. Die Brennstoffzelle wird bei diesem Konzept direkt mit der Batterie gekoppelt. Durch die Anpassung des Gasdrucks auf der Anode und damit des Wasserstoffpartialdrucks lässt sich die Strom-Spannungskennlinie der Brennstoffzelle beeinflussen. Durch dieses Konzept lässt sich die Stromproduktion der Brennstoffzelle leicht regeln. Der Einfluss des Partialdrucks ist bei hohen Stromdichten höher, wodurch auch die Einflussmöglichkeiten der Steuerung steigen. Bei einem von Nishizawa et al. [39] vorgeschlagenen Konzept werden die Brennstoffzelle und die Batterie mittels Dioden parallel verschaltet. Es wird jeweils eine Diode in Serie mit einem Energiewandler verschaltet. Die Diode vor der Brennstoffzelle verhindert negative Stromflüsse. Diese sind laut [39] bei einer angemessenen Systemauslegung nur nötig, wenn Bremsenergie in die Batterie gespeist werden soll. Die Diode vor der Batterie verhindert ein unbeabsichtigtes Aufladen der Batterie durch diese Verbindung. Die Batterie wird bei diesem Konzept durch einen Batterielader parallel zur Diode, bestehend aus Mosfets, der mit der Brennstoffzelle verbunden ist, geladen. Die Strom-Spannungskurven für dieses Konzept sind in Abb. 3.10 dargestellt. Bei diesem Konzept versorgt die Brennstoffzelle den Verbraucher permanent mit Energie. Bei steigendem Leistungsbedarf sinkt die Spannung der Brennstoffzelle. Sobald die Brennstoffzellenspannung die offene Zellspannung der Batterie unterschreitet, liefern beide Komponenten Leistung. Es ist wichtig, dass sich die Spannungsbereiche der beiden Komponenten überschneiden.

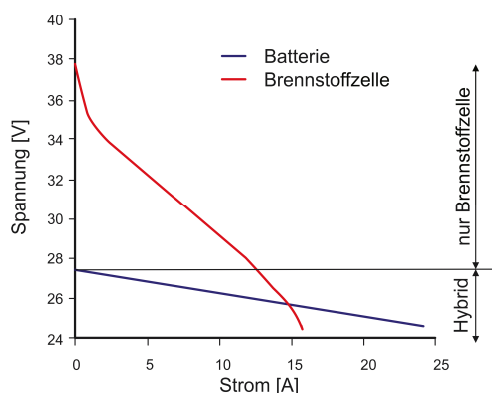


Abb. 3.10: Strom-Spannungskennlinie für das Konzept nach [39]

Bei einem niedrigen Leistungsbedarf deckt die Brennstoffzelle diesen Leistungsbedarf vollständig ab. Mit zunehmendem Leistungsbedarf sinkt die Spannung der Brennstoffzelle. Sobald diese unter die offene Zellspannung der Batterie abfällt, wird Leistung durch die Brennstoffzelle und die Batterie bereitgestellt. Durch die geringere Steigung in der Batteriekennlinie steigt der Leistungsanteil der Batterie mit zunehmendem Leistungsbedarf. Der Leistungsverlust bei dieser Verschaltung wird bei einer Gesamtleistung von 1 kW zu 4 % angegeben [39].

### 3.2.1.2 Aktive Hybridsysteme

Die Verschaltungskonzepte zum aktiven Hybridsystem sind in Abbildung 3.11 dargestellt. Durch das Hinzufügen eines Spannungswandlers kann eine Komponente hinsichtlich ihrer Spannung von den anderen Komponenten entkoppelt werden. Dies führt für die jeweilige Komponente dazu, dass die offene Zellspannung unabhängig von den anderen Komponenten gewählt werden kann.

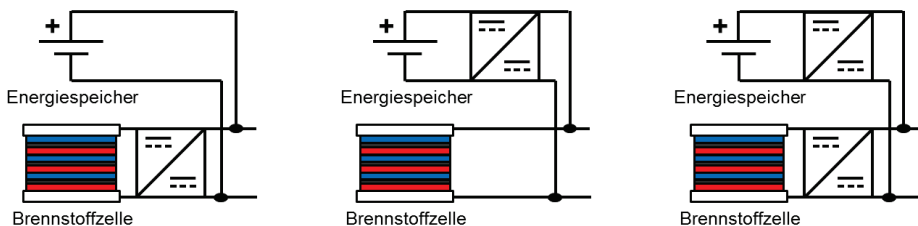


Abb. 3.11: Verschaltungskonzepte für aktive Hybridsysteme: Entkopplung der Brennstoffzelle (links), des Energiespeichers (Mitte) und der Brennstoffzelle und des Energiespeichers (rechts)

Wird die Brennstoffzelle mit einem Spannungswandler verschaltet (Abb. 3.11 links), so kann die Anzahl der einzelnen Brennstoffzellen frei gewählt werden. Die Brennstoffzelle kann dann innerhalb ihrer Spannungs- und Stromgrenzen frei betrieben werden. Die Spannung der Batterie ergibt sich bei diesem Konzept aus der Differenz zwischen der benötigten Leistung und der von der Brennstoffzelle produzierten Leistung. Die Verbraucherschwankung ändert sich bei diesem Konzept mit der Batteriespannung. Somit steigt bei einem Leistungsüberschuss der Brennstoffzelle der Ladezustand der Batterie und damit die Batterie- und Verbraucherspannung.

Bei der Entkoppelung der Batterie (Abb. 3.11 Mitte), ist diese frei dimensionier- und betreibbar. In diesem Betriebsmodus deckt die Brennstoffzelle kurzfristige Leistungsbedarfsänderungen ab, bis die Elektronik auf diese reagiert hat. Da der innere Widerstand der Brennstoffzelle in der Regel größer ist, als der der Batterie, ist die Änderung der Brennstoffzellenspannung größer als eine Spannungsänderung der Batterie bei der gleichen Leistungsänderung. Die Spannung des

Verbrauchers ist bei diesem Konzept an die Brennstoffzellenspannung gekoppelt. Die Variation der Verbraucherspannung ist höher als bei der Verschaltung in der die Brennstoffzelle mit dem Spannungswandler verbunden ist. Weiterhin wird die Brennstoffzelle dynamischer betrieben.

Bei einem System aus Spannungswandler und Batterie (Abb. 3.11 rechts) können durch den Einsatz von zwei Gleichstromspannungswandlern alle Spannungsniveaus entkoppelt werden. Die Spannung des Verbrauchers kann konstant gehalten werden. Um dieses Konzept umzusetzen ist eine hohe Dynamik mindestens eines Spannungswandlers erforderlich. Prinzipiell können die Brennstoffzelle und die Batterie innerhalb ihrer Spannungs- und Stromgrenzen frei betrieben werden. Die Leistung der Batterie und der Brennstoffzelle muss jedoch zusammen den Leistungsbedarf des Verbrauchers decken.

Von den hier vorgestellten Konzepten ist das erste Konzept, bei dem die Brennstoffzelle mit dem Spannungswandler in Serie geschaltet ist, für das bestehende Brennstoffzellensystem am besten geeignet. Die Verbraucherspannung schwankt nur geringfügig mit der Batteriespannung und die Brennstoffzelle wird kaum dynamisch belastet. Bei dem zweiten Konzept wird die Brennstoffzelle stärker dynamisch gefordert und die Verbraucherspannung schwankt stärker. Das dritte Konzept führt zu einer konstanten Spannung des Verbrauchers, benötigt jedoch zwei Spannungswandler und eine hochdynamische Steuerung. Dieses Konzept ist nur zu empfehlen, wenn nur sehr kleine Spannungsschwankungen toleriert werden können. Dies ist bei einem System zur Bordstromversorgung nicht der Fall.

### 3.2.2 Betriebsstrategien

Die Betriebsstrategie ist ein Thema, das hauptsächlich für aktive Hybridsysteme von Bedeutung ist, da die passiven Hybridsysteme aufgrund der direkten Kopplung kaum Steuerung zulassen. Die im Folgenden vorgestellten Betriebsstrategien wurden hauptsächlich für Brennstoffzellenfahrzeuge entwickelt. In der Literatur gibt es kaum Betriebsstrategien für die Bordstromversorgung. Diese Betriebsstrategien werden hinsichtlich ihrer Eignung für die Anwendung als Bordstromversorgung untersucht.

An die Betriebsstrategie werden verschiedene Anforderungen gestellt. Die Betriebsstrategie soll den Wirkungsgrad des Systems erhöhen und dadurch den Kraftstoffverbrauch minimieren. Die Leistung der Brennstoffzelle soll in einem gewissen Bereich gehalten und die Leistungsänderungsraten sollen limitiert werden. Weiterhin müssen die Ladezustandsgrenzen der Batterie eingehalten werden. Die Auswahl der Betriebsstrategie ist abhängig von der ausgewählten Hybridverschaltung und den Besonderheiten des Systems und der Anwendung. Bei den Betriebsstrategien gibt es viele verschiedene Konzepte. Die Hauptzahl der Konzepte basiert auf der Maximierung des Wirkungsgrades. Diese Konzepte werden oft in Verbindung mit der Einhaltung der Ladezustandsgrenzen kombiniert. Als Regelungsgrößen werden der Wirkungsgrad, der Ladezustand der Batterie oder die Spannung verwendet. Die Ausführung eines Konzeptes wird durch die Verschaltung beeinflusst. So wird bei einer direkten Verschaltung der Brennstoffzelle mit dem Verbraucher die Batterie kontrolliert, so dass sie die Brennstoffzelle unterstützt. Bei

einer direkten Verschaltung der Batterie mit dem Verbraucher liefert die Batterie die Leistung an den Verbraucher und wird durch die Brennstoffzelle wieder aufgeladen. Die grundlegenden Konzepte sind jedoch unabhängig von der Verschaltung des aktiven Hybridsystems.

Von Xiao und Wang [40] wurde eine Strategie vorgestellt, bei der das Hauptentscheidungsmerkmal der maximale Brennstoffzellenwirkungsgrad ist. Bei diesem Konzept wird die Brennstoffzelle, bis der Ladezustand der Batterie 30 % unter- oder 90 % überschreitet, an dem Punkt mit dem besten Wirkungsgrad betrieben. Außerhalb dieser Grenzen muss die Brennstoffzellenleistung an den Leistungsbedarf angepasst werden. In [41] wurde eine Betriebsstrategie vorgeschlagen, bei der die Brennstoffzelle in dem Bereich arbeiten soll, in dem sie einen hohen Wirkungsgrad aufweist. Die Betriebsmodi zu diesem Konzept sind in Abbildung 3.12 mit dem Brennstoffzellenwirkungsgrad über der Leistung eingezeichnet (Konzept 1). Die Brennstoffzelle wird nur im Bereich des höchsten Wirkungsgrades alleine betrieben. Bei einem niedrigen Leistungsbedarf wird der Bedarf ausschließlich aus der Batterie gedeckt. Ein hoher Leistungsbedarf wird von der Brennstoffzelle und der Batterie zusammen gedeckt. Weiterhin wurde von Zheng [42] eine ähnliche Strategie (Konzept 2) vorgestellt, bei der auf den reinen Brennstoffzellenbetrieb verzichtet wurde. Dieser wurde dann ebenfalls durch den Hybridmodus abgedeckt.

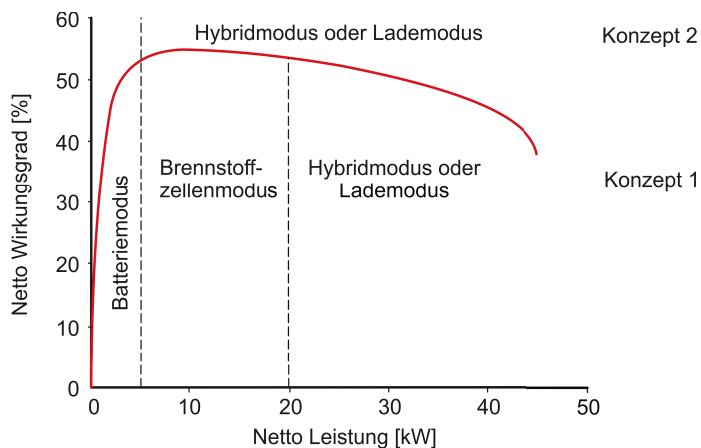


Abb. 3.12: Betriebsstrategie basierend auf dem Brennstoffzellenwirkungsgrad: Einteilung der Betriebsmodi nach [41] und [42]

Von Xuan et al. [43] wurde ein vergleichbares Konzept für hybride Fahrzeuge vorgestellt. Die Batterie wird zum Starten des Fahrzeuges bis zum Überschreiten einer Geschwindigkeit- oder Leistungsschwelle verwendet. Oberhalb dieser Schwelle startet die Brennstoffzelle und versorgt zuerst alleine den Motor. Erst während Beschleunigungsphasen liefert die Batterie eine zusätzliche Leistung. Rekuperierte Bremsenergie kann unterhalb einer gewissen Ladezustandsgrenze in die Batterie eingespeist werden. Die Batterie liefert nur oberhalb einer vorgegebenen Ladezustandschwelle Leistung an den Motor. Obwohl dieses Konzept eher auf die Betriebsphasen

des Kraftfahrzeugs ausgerichtet ist, entspricht es eigentlich dem Prinzip eines möglichst hohen Brennstoffzellenwirkungsgrades. Das Konzept von Chandrasekaran et al. [44] entspricht ebenfalls diesem Konzept. Es wird erwähnt, dass bei einem niedrigen Leistungsbedarf und einem niedrigen Ladezustand der Batterie die Batterie wieder durch die Brennstoffzelle aufgeladen wird. Dieses kann sowohl bei einer positiven, als auch negativen Leistung des Motors der Fall sein. Als Ladezustandsgrenze wird bei dem Fall der Bremsenergienutzung ein maximaler Ladezustand von 70 % genannt. Garcia et al. [45] stellten eine Strategie zur Minimierung des äquivalenten Kraftstoffverbrauchs vor. Bei diesem Konzept sind alle Energiewandler und -speicher mit einem Spannungswandler verbunden. Das Ziel dieses Konzeptes ist ein möglichst geringer Wasserstoffverbrauch. Dieses Konzept entspricht ebenfalls einem Konzept bei dem der maximale Wirkungsgrad anvisiert wird.

Etthir et al. [46] stellen eine Energiemanagementstrategie basierend auf dem SOC vor. Bei dieser Strategie gibt es für die Brennstoffzelle drei verschiedene Modi. Die Brennstoffzelle kann bei dem maximalen Wirkungsgrad oder bei der maximalen Leistung betrieben werden, oder ausgeschaltet sein. Die Strategie ist in Abbildung 3.13 dargestellt. Oberhalb der oberen Ladezustandsgrenze ( $SOC_{oben}$ ) wird die Brennstoffzelle ausgeschaltet. Im Bereich zwischen der oberen und unteren Grenze wird die Brennstoffzelle bei ihrem maximalen Wirkungsgrad betrieben. Sobald der Ladezustand unter die untere Grenze ( $SOC_{unten}$ ) absinkt, wird die Brennstoffzelle mit der maximalen Leistung betrieben. Bei den Ladezustandsgrenzen gibt es eine Hysterese. Diese ist notwendig, damit im Bereich der Ladezustandsgrenzen nicht permanent der Modus gewechselt wird.

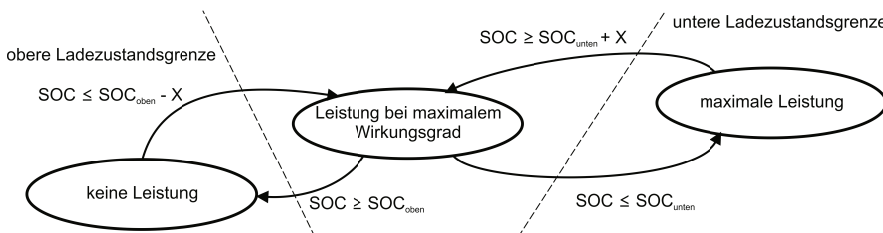


Abb. 3.13: Betriebsstrategie mit ladezustandsbasierten Betriebszuständen nach [46]

Eine experimentelle Untersuchung verschiedener Betriebsstrategien ist in [47] veröffentlicht. Der Betrieb der Brennstoffzelle bei maximalem Wirkungsgrad führte zu einer Entladung der Batterie, während der Betrieb mit maximaler Leistung zu einem schlechteren Wirkungsgrad und einer überladenen Batterie führte. Die Verwendung einer adaptiven Strategie, bei der in Abhängigkeit des Ladezustands zwischen den beiden Strategien gewechselt wird, führte dazu, dass der Bedarf gedeckt werden kann.

Von Zhang et al. [48] wurde ein Konzept vorgestellt, bei dem die Batterie in einem vorgegebenen Ladezustandsbereich die benötigte Leistung alleine bereitstellt. Erst bei einem Ladezustand von unter 40 % springt die Brennstoffzelle mit ein. Die Brennstoffzelle liefert dann die benötigte Leistung und ladet zusätzlich die Batterie wieder auf. Sobald ein Ladezustand von 80 %



erreicht ist, wird die Brennstoffzelle abgetrennt und die Batterie versorgt den Leistungsbedarf. Von Ouyang et al. [49] wurde eine Strategie vorgeschlagt, die darauf basiert, dass der Ladezustand der Batterie bei 80 % verbleibt. Bei einem niedrigeren Ladezustand steigt die Ladeleistung der Batterie linear zur Ladezustandsdifferenz an. Dieser Zusammenhang ist in Abbildung 3.14 dargestellt. Bei einem höheren Ladezustand wird die Batterie entladen. Dieses Konzept fñhrt dazu, dass die Batterie bei einer Abweichung vom gewünschten Ladezustand zuerst mit einem niedrigen Strom geladen wird. Mit zunehmender Abweichung vom gewünschten Ladezustand steigt der Lade- oder Entladestrom an und die Batterie wird stärker gefordert. Bei diesem Konzept ist die Brennstoffzelle mit dem Spannungswandler in Serie geschaltet. Die Leistung der Brennstoffzelle wird bei diesem Konzept permanent angepasst. Bei einem Konzept von Sato et al. [50] wird die Brennstoffzellenleistung angepasst, sobald sich der Ladezustand außerhalb des vorgegebenen Intervalls befindet. Weiterhin wird darauf geachtet, dass die Batterie die Differenz zwischen dem Leistungsbedarf und der Leistung der Brennstoffzelle liefern kann.

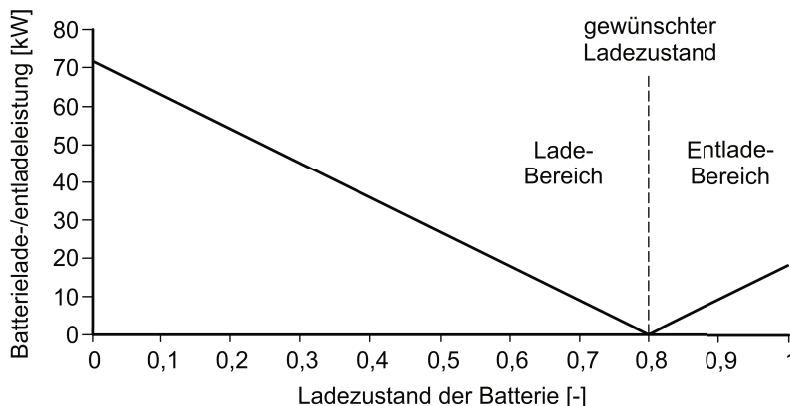


Abb. 3.14: Betriebsstrategie für die Einhaltung eines gewünschten Ladezustands nach [49]

Für ein Brennstoffzellensystem, bei dem die Batterie mit einem Spannungswandler verbunden ist und die Brennstoffzelle direkt mit dem Verbraucher verbunden ist, wurde eine andere Strategie von Ouyang et al. [49] vorgeschlagt. Bei einer Veränderung des Leistungsbedarfs ändert sich die Spannung der Brennstoffzelle. Das vorgeschlagte Konzept regelt die Spannungslage des Verbrauchers. Sinkt die Spannung unter einen unteren Grenzwert, wird die Brennstoffzelle mit einer konstanten unteren Spannung betrieben und der Spannungswandler arbeitet als Hochsetzsteller, um die Batterie zu entladen. Andererseits beim Überschreiten einer oberen Spannungsgrenze wird der Spannungswandler als Tiefsetzsteller betrieben und die Batterie geladen. Durch dieses Konzept kann die Spannung in einem vorgegebenen Intervall gehalten werden.

Schaltz et al. [51] stellen zwei Betriebsstrategien für ein Brennstoffzelle-Batterie-Superkondensator

Hybridsystem vor. Bei dem ersten Konzept wirkt der Superkondensator als Hochpassfilter verwendet. Die Brennstoffzelle und die Batterie werden jeweils mit einem Tiefpassfilter versehen. Die Bandweite des Tiefpassfilters der Batterie ist höher, als die Bandweite des Tiefpassfilters der Brennstoffzelle. Die Brennstoffzelle stellt die Grundlast zur Verfügung, die Batterie den Leistungsbedarf mit einer niedrigen Änderungsfrequenz und der Superkondensator den restlichen Leistungsbedarf. Bei der zweiten Strategie wird der Superkondensator größer dimensioniert. Der Superkondensator deckt den sich ändernden Anteil des Leistungsbedarfs ab und die Batterie behält ihren Ladezustand. Um den Superkondensator nicht zu überladen, wird die Ladeleistung in Abhängigkeit von dem Ladezustand berechnet.

Die in diesem Kapitel vorgestellten Verschaltungsarten und Betriebsstrategien haben einen Einfluss auf die Dimensionierung der Batterie und die Betriebsweise der Brennstoffzelle und der Batterie. In dieser Arbeit soll der Einfluss der verwendeten Verschaltung und Betriebsstrategie auf die Dimensionierung und die Anforderungen an die Komponenten im Hybridsystem untersucht werden.

## 3.3 Anfahrstrategien für Brennstoffzellensysteme

Für den Startvorgang eines Brennstoffzellensystems gibt es in der Literatur verschiedene Konzepte. Diese können grob in elektrische und thermische Konzepte eingeteilt werden. Bei der elektrischen Aufheizung gibt es wiederum verschiedene Aufheizstrategien. Die meisten Konzepte wärmen einen kleinen Teil des Reformers auf, um die Reaktion zu zünden. So wird von Lee et al. [52] ein kleiner elektrischer Heizdraht verwendet, um den Katalysator aufzuheizen und das Kraftstoff-Luft-Gemisch zu zünden. Bei dem Packagekonzept von Yoon et al. [53] ist oberhalb des Reformerkatalysators ein Heizdraht eingebaut. Dieser wird für den Startvorgang verwendet. Bei Qi et al. [54] wird der Startvorgang durch das Aufheizen eines Platindrahtes realisiert. Dieser wird 3 Sekunden lang mit einer Leistung von 50 W aufgeheizt. Danach wird Benzin und Luft in einem leicht überstöchiometrischen Verhältnis zugegeben. Das Gemisch zündet dann an dem heißen Draht und produziert ein heißes Abgas, mit dem die übrigen Komponenten erwärmt werden. Während des Startvorgangs wird ein hinter dem ATR verbautes Ventil geöffnet, um die nachgeschalteten Komponenten zu schützen. Der Reformer wird zuerst mit einem  $O_2/C$  Verhältnis von 2 betrieben. Das Lüftungsventil wird bei einer Temperatur von 700 - 800 °C geschlossen und das  $O_2/C$  Verhältnis auf 0,5 reduziert. Bei dem Konzept von Severin et al. [55] wurde ein Prototyp eines Brenngaserzeugungssystems basierend auf der autothermen Reformierung vorgestellt. Bei diesem System mit einer Leistung von 9 kW<sub>th</sub> wird zuerst mit einer elektrischen Leistung von 800 W Luft aufgeheizt und dann die partielle Oxidationsreaktion gestartet. Eine Rekuperation der Wärme nach dem Reformer verkürzt die benötigte Aufheizzeit um ein Drittel. Eine zusätzliche Beheizung mit 800 W und die Erzeugung eines Hot Spots auf dem Katalysator verkürzt die Aufheizzeit um weitere 80 % auf 100 Sekunden. Die aufgewendete Energie sinkt trotz der doppelten benötigten Leistung von 600 kJ auf 160 kJ. Es wird berichtet, dass eine Reduktion der Masse des Wärmeübertragers und des Wassergasshiftreaktors um 50 % zu einer Reduktion der Startzeit von 30 Minuten auf

10 Minuten führt. Von Springmann et al. [56] wird ein Startvorgang basierend auf einer kurzzeitigen Aufheizung und anschließender Oxidation vorgestellt. Der Katalysator im Reformer ist in zwei Teile eingeteilt. Bei dem ersten Katalysator handelt es sich um einen beschichteten metallischen Monolithen, der elektrisch beheizt werden kann. Beim Start des Reformers wird zuerst der elektrische Katalysator beheizt. Dieser benötigt ca. 5 Sekunden bis er die benötigte Temperatur für die partielle Oxidation erreicht hat. Danach stehen entweder die partielle oder die totale Oxidation zur Aufheizung zur Verfügung. Sobald der Reformer aufgeheizt ist, kann auf den autothermen Betrieb umgeschaltet werden. Bei der partiellen Oxidation wird der Reformer mit einer Luftzahl von 0,25 betrieben. Höhere Luftverhältnisse wirken sich positiv auf den Startvorgang aus, jedoch ist die maximale Temperatur im Reformer hier limitierend. Bei der totalen Oxidation wird die Leistung durch die hohen benötigten Luftvolumenströme bei einer Stöchiometrie von 3 limitiert. Aufgrund der schnelleren Aufheizung wird die totale Oxidation bevorzugt.

Neben der elektrischen Aufheizung ist die Aufheizung durch die Verbrennung des Kraftstoffs in der Literatur weit verbreitet. Bei dieser Aufheizungsmethode gibt es in der Literatur eine Vielzahl von unterschiedlichen Konzepten. So wird teilweise ein Brenner in den Reformer oder den katalytischen Brenner integriert. In manchen Quellen werden ein oder mehrere Startbrenner verwendet, das Abgas wird den verschiedenen Reaktoren gleichzeitig durch zusätzliche Leitungen zugegeben oder es wird Luft in die verschiedenen Reaktoren geleitet, um dort eine stufenweise partielle Oxidation stattfinden zu lassen. Von Kim et al. [57] wurde ein Reformer patentiert, der um einen zylindrischen katalytischen Brenner angeordnet ist. Im Brenner ist in der Nähe des Eintritts eine elektrische Heizung eingebaut um den Startvorgang zu beschleunigen. Sobald die Oxidationstemperatur im Katalysator erreicht wird, werden Kraftstoff und Luft zugegeben. Der Brenner überträgt die Wärme durch die Brennerhülle an den Reformer. Beim Erreichen der benötigten Reformierungstemperatur werden Kraftstoff und Wasserdampf hinzugegeben. Ein ähnlicher Aufbau ist in einem Patent von Lee et al. [58] zu finden. Bei diesem Aufbau sitzt der Brenner in einem inneren Rohr, das von einem anderen Rohr umgeben ist, indem der Reformierungskatalysator verbaut ist. Das Abgas umströmt das zweite Rohr nochmal.

Bei Liu et al. [59] wurde ein hybrider Brenner für Brennstoffzellenanwendungen patentiert. Der Brenner soll die Vorteile von Flammen- und Katalytbrennern vereinen. Beim Startvorgang wird der Flammenbrenner verwendet und das Abgas wird durch den katalytischen Brenner geleitet. Sobald dieser seine Betriebstemperatur erreicht hat, wird auf den katalytischen Brennerbetrieb umgestellt. Somit vereint dieser Brenner die schnelle Startzeit eines Flammenbrenners mit den niedrigen Emissionswerten eines Katalytbrenners. Von Boltze et al. [60] wurde ein katalytischer Brenner patentiert, der während des Startvorgangs als Startbrenner verwendet werden kann. Das Patent sieht beim Startvorgang den Betrieb des Brenners als Startbrenner vor. Der Reformer soll dann im Brennerbetrieb gestartet werden und nach einer Zeit auf den Reformerbetrieb umgeschaltet werden. Danach soll die Brennstoffzufuhr zum katalytischen Brenner beendet werden. Ein auf einem Startbrenner basierender Startvorgang wurde ebenfalls von Iio [61] patentiert. Das Brennerabgas kann durch zusätzliche Zuleitungen den Komponenten Reformer, Wassergasshift und präferentieller Oxidation (PROX) zugeleitet werden. In den

Wassergasshiftreaktor strömt sowohl das Abgas des Brenners, dass durch die zusätzliche Leitung direkt vom Brenner kommt, als auch das bereits teilweise abgekühlte Brennerabgas aus dem Reformer. Vor der Zuleitung in den Shiftreaktor strömt das Gas durch einen Gasmischer, um eine gleichmäßige Verteilung zu erhalten.

Ein Aufsatz für den ATR wurde von Zhao et al. [62] patentiert. Bei diesem Konzept werden zwei Brenner verwendet. Ein katalytischer Brenner, der auch während des Startvorgangs verwendet wird und ein auf den Reformer aufgesetzter Startbrenner. Bei dem auf den Reformer aufgesetzten Startbrenner findet die Verbrennung in zwei Zonen statt. In der ersten Zone wird ein kraftstoffreiches Kraftstoff-Luft Gemisch gezündet. Die Überstöchiometrie an Kraftstoff führt zu niedrigen Verbrennungstemperaturen und einer niedrigeren Stickoxidbildung. Das kraftstoffreiche Abgas der ersten Stufe wird anschließend nach erneuter Luftzugabe verbrannt und in den Reformer geleitet. Das Abgas des katalytischen Brenners wird verwendet, um die Edukte für den Startbrenner vorzuwärmen. Es wurde ebenfalls ein integriertes Modul vorgestellt, bestehend aus Reformer, Startbrenner und zweistufigem Wassergasshiftreaktor. Von Lee et al. [63] wurde ein Startvorgang für ein auf Dampfreformierung basierendes 200  $W_{el}$  System vorgestellt. Eine Zündkerze zündet das Kraftstoff-Luft-Gemisch hinter dem Katalysator des Brenners. Von Goebel et al. [64] wurde ein Startvorgang patentiert. Bei diesem Systemaufbau ist ein Brenner vor dem Reformer und vor dem Wärmeübertrager des WGS platziert. Der erste Brenner wird mit einem kraftstoffarmen Verhältnis betrieben. Das Abgas des ersten Brenners wird durch Ventile zu einem zweiten Brenner geleitet. Dort strömt es durch den katalytischen Brenner und an der Kraftstoffdüse vorbei. Neuer Kraftstoff wird in das Abgas eingedüst und in der Flammenzone verbrannt. Nach der Verbrennung wird Wasser eingedüst um die Temperaturen zu reduzieren. Ein integrierter Wärmeübertrager wird genutzt um Wasserdampf zu produzieren.

Von Goebel [65] wurde ein Brenner entwickelt und patentiert, der in der Lage ist, Wasser zu verdampfen. Dieser Direktverdampfungsbrenner besteht aus zwei Kammern. Die erste Kammer ist die Verbrennungskammer. Das heiße Abgas strömt durch eine Verengung aus der Verbrennungskammer in eine zweite Kammer in der Wasser eingedüst und durch das heiße Abgas verdampft wird. Die Verengung sorgt für eine Beschleunigung der Strömung und dafür, dass sich die Strömung an dieser Stelle nicht ablöst, was sonst zu einem Wassereintrag in die Flammenzone führen könnte. Für nicht verdampftes Wasser sind bei diesem Brenner Abflusskanäle vorgesehen. Dieser Brenner soll für ein Brennstoffzellensystem basierend auf einer PEM eingesetzt werden. Wenn das Wasser gefroren ist, wird das Abgas des Brenners verwendet, um mittels eines Wärmeübertragers das Wasser aufzutauen. Von Robb und Pettit [66] wurde eine Methode der stufenweisen Oxidation eines kraftstoffreichen Gemischs patentiert. Bei diesem Konzept sind im Brenngaserzeugungssystem eine Vielzahl von Lufterndüsen vorgesehen, um das kraftstoffreiche Abgas zu verbrennen. Die Wärme entsteht direkt in den Reaktoren, wo sie auch benötigt wird und die mögliche Leistung zum Aufheizen wird dadurch nicht mehr so stark durch das Gebläse limitiert. Bowers et al. [67] berichten von einem Systemstart durch die Verbrennung von Benzin. Die thermische Leistung wird nach zwei Minuten von 6 kW auf 30 kW erhöht. Innerhalb von 3 Minuten und 43 Sekunden fällt der Kohlenmonoxidanteil im Reformat unter 100 ppmv, sodass die Brennstoffzelle Strom produzieren kann. Es wird von einer

Reduktion der Startzeit von 75 Minuten auf 3 Minuten und 43 Sekunden berichtet. Dies wurde durch mehrere Faktoren erzielt. Zum einen wurde ein Wechsel von Pellets zu beschichteten Substraten und eine bessere Integration der Reaktoren und der Wärmeübertrager durchgeführt und eine Verbesserung der Regelkomponenten und eine optimierte Kontrollstrategie realisiert.

Von Zartenar [68] wurde ein Vorwärmer für ein Brennstoffzellensystem patentiert. Das Anodenrestgas wird von der Anode in einen katalytischen Brenner geleitet und das heiße Abgas strömt anschließend durch die Kathode der Brennstoffzelle.

In diesem Kapitel wurden verschiedene Startstrategien vorgestellt. Diese konnten in die elektrische und die thermische Aufheizung des Systems unterteilt werden. Die elektrische Aufheizung eines kleinen Teils des Reformers ist keine Option für das bestehende System. Der Kraftstoff muss vor der Reformierung vollständig verdampft werden. Die benötigte Energie für die Verdampfung des Kraftstoffs wird durch die Zufuhr von heißem Wasserdampf gewährleistet. Dieser kann erst nach der Aufheizung des Systems auf eine Temperatur oberhalb des Taupunktes zugegeben werden. Die Aufheizung durch das heiße Abgas eines Brenners wird ebenfalls ausgeschlossen, da es zu kohlenstoffhaltigen Ablagerungen kommen könnte. Es verbleiben 2 Startkonzepte, die weiter verfolgt werden. Bei diesen Konzepten handelt es sich um die elektrische Aufheizung von Luft und elektrische Verdampfung und Überhitzung von Wasser und die indirekte Aufheizung des Systems durch einen Startbrenner.

### 3.4 Packaging von Brenngaserzeugungssystemen

Die kompakte Bauform ist ein wichtiger Punkt bei einem mobilen System. Das Packaging hat einen direkten Einfluss auf die Energie- und Leistungsdichte des Systems. Weiterhin muss für einen hohen Systemwirkungsgrad jedoch auch der Druckverlust des Systems möglichst gering gehalten werden. Ein Überblick über die erreichte Leistungsdichte der in der Literatur vorgestellten Packages ist in [26] gegeben. In diesem Abschnitt werden verschiedene Brenngaserzeugungspackages und die zugrundeliegenden Annahmen vorgestellt. Im Anschluss daran werden die vorgestellten Packagekonzepte hinsichtlich ihrer Eignung für das Brenngaserzeugungssystem des IEK-3 bewertet.

Lee et al. [52] stellten ein integriertes Brenngaserzeugungssystem basierend auf Erdgas vor. Dieses Brenngaserzeugungssystem, basierend auf einem autothermen Methanreformer, einer Entschwefelung und einem Wassergasshiftreaktor, ist in Abbildung 3.15 dargestellt. Der autotherme Reformer ist in der Mitte eines Zylinders angeordnet. Das Reformat wird nach dem Reformer umgelenkt und strömt zuerst durch die Entschwefelung und danach durch den Wassergasshiftreaktor. Die Luft und das Wasser für den ATR werden in zwei integrierten Wärmeübertragern vor der Zugabe in den ATR vorgewärmt. Das erstellte Package hat bei einer thermischen Leistung zwischen 3,1 und 16 kW ein Volumen von 17,3 Liter. Durch das zylindrische Konzept gibt es nur eine interne Umlenkung. Auf externe Verrohrung zwischen den einzelnen Reaktoren wird vollständig verzichtet. Es ist weiterhin nur eine Isolierung um das

Package herum notwendig. Ein Nachteil, der bei diesem System auftritt, könnte sein, dass das Reformat in der Umlenkung Wärme an den WGS abgibt und sich durch die höhere Temperatur am Austritt des WGS der Umsatz des Kohlenmonoxids reduziert.

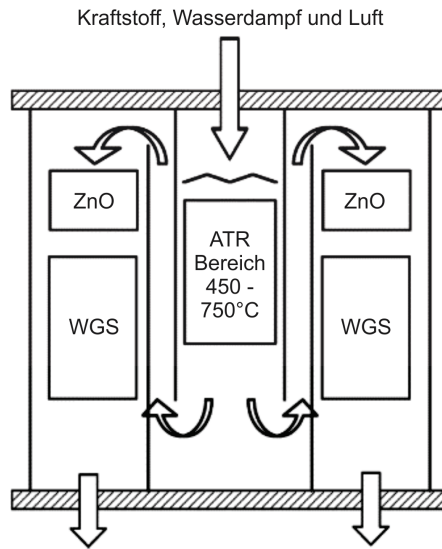


Abb. 3.15: Zylindrisches Brenngaserzeugungspackage für Erdgas [52]

Ein von Yoon et al. [53] vorgestelltes zylindrisches Packagingkonzept ist in Abbildung 3.16 dargestellt. Dieses basiert auf einem autothermen Reformer, einer Entschwefelung und einer Gasnachbehandlung und ist für eine elektrische Leistung von 1 kW ausgelegt. Bei diesem Konzept ist der Reformer mit einer Zweistoffdüse für Kraftstoff und Luft in der Mitte verbaut. Der Reformer ist von einem Nachreformierungsbereich und einer Entschwefelung umgeben, wobei das Reformat zuerst durch die Entschwefelung strömt und dann durch den Nachreformierungsbereich. Die Volumen der Katalysatoren werden zu 250 ml für den Reformer und 400 ml für die Entschwefelung angegeben. Um den Entschwefelungsteil ist ein Wärmeübertrager in die Hülle integriert. Dieser reduziert die Gastemperatur und verdampft das für den Reformer benötigte Wasser. Dieses Konzept vereint ebenfalls die Vorteile des zylindrischen Konzepts. Der integrierte Wärmeübertrager in der Hülle des Packages führt zu einer Abkühlung des Reformats, was sich positiv auf den Umsatz im WGS auswirken sollte. Die überschüssige Wärme im Reformat kann genutzt werden, um den benötigten Wasserdampf zu erzeugen. Gleichzeitig werden durch den Wärmeübertrager die Wärmeverluste an die Umgebung reduziert. Ein Nachteil dieses Konzeptes ist die Verwendung der Zweistoffdüse, die in der Regel zu hohen Druckverlusten führt.

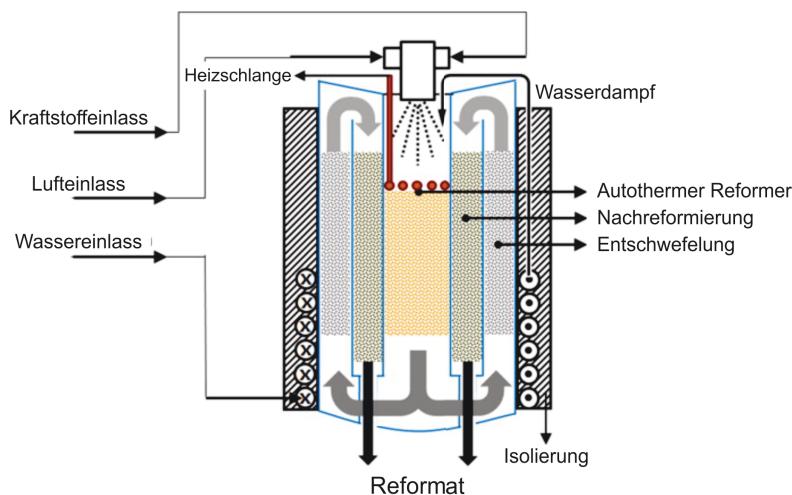


Abb. 3.16: Brenngaserzeugungspackage für Diesel [53]

Von Roychoudhury [69] wurde ein zylindrisches modulares Brenngaserzeugungssystem basierend auf einem ATR und einer Entschwefelung vorgestellt. Bei diesem Package wird durch eine Dreistoffdüse Kraftstoff, Luft und Wasserdampf in die Mischkammer des Reformers geleitet. Das Reformat strömt nach der Reformierung in den seitlichen Bereich, wo die Wärme genutzt wird um Wasser zu verdampfen, welches für den ATR benötigt wird. Das Reformat gelangt anschließend in die Entschwefelung. Das vorgestellte System hat eine thermische Leistung von 5 kW, ein Volumen von 3 l und eine Masse von 5 kg. Für eine HT-PEFC oder eine PEFC kann zusätzlich ein Wassergasshiftreaktor nach der Schwefelfalle nachgeschaltet werden. Dieses Konzept weist die Vorteile eines zylindrischen Konzeptes auf. Durch die Dreistoffdüse treten bei diesem Konzept jedoch auch hohe Druckverluste in der Düse auf.

Qi et al. [54] stellten ein Brenngaserzeugungssystem basierend auf Benzin mit einer Leistung von 1 kW vor. Es wurde nicht angegeben, ob es sich um die thermische oder die elektrische Leistung handelt. Bei diesem Aufbau (Abbildung 3.17) handelt es sich ebenfalls um ein zylindrisches Package, bei dem der autotherme Reformer in der Mitte angeordnet ist. Um den Reaktor herum sind die Hochtemperatur- und die Niedertemperaturshiftstufe angeordnet. Wasser kann durch verschiedene Zuleitungen dosiert werden. Diese Leitungen verlaufen dann durch jeweils einen Wärmeübertrager, wodurch die Temperatur an den entsprechenden Stellen beeinflusst werden kann. Die Wärmeübertrager sind im ATR Katalysator, vor dem HTS und vor dem NTS angeordnet. Das Wasser gelangt anschließend in den Luftspalt und danach zum Reformer. Die Luft wird durch einen äußeren Spalt geführt, der dafür sorgt, dass der Wärmeverlust minimiert wird. Der Kraftstoff wird durch eine der Wasserleitungen zugegeben. Dieses Brenngaserzeugungssystem erreicht eine Leistungsdichte von 0,3 kW/l. Die zusätzlichen Vorteile dieses Packages sind, dass die Wärmeverluste durch den äußeren Luftspalt reduziert werden

und das die Temperaturen in den einzelnen Stufen durch die Zufuhr von Wasser kontrolliert werden können. Weiterhin werden durch diesen Vorgang die Edukte vortemperiert. Beim Start des Systems kann ein Ventil nach dem Reformer geöffnet werden, um die nachfolgenden Komponenten zu schützen.

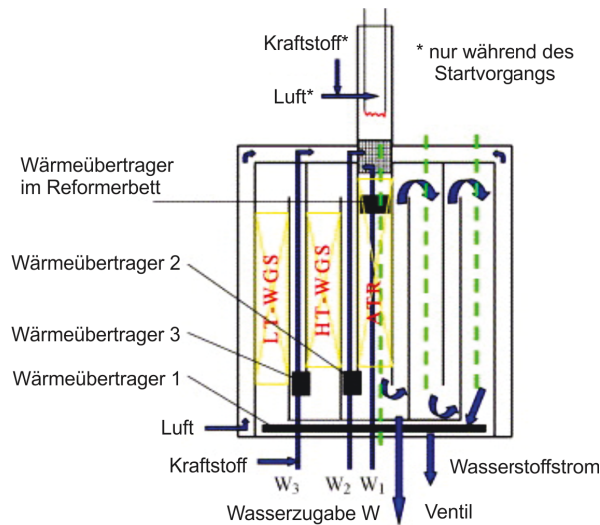


Abb. 3.17: Brenngaserzeugungspackage für Benzin [54]

Von Bentley et al. [70] wurde ebenfalls ein zylindrisches Packagekonzept patentiert. Bei diesem Konzept befinden sich in einem zylindrischen Metallmantel von innen nach außen sequentiell angeordnete Reaktionszonen. An den Grenzen zwischen den Zonen befinden sich durchlässige Abtrennungen. Die Strömungsrichtung breitet sich von der inneren ersten Zone ausgehend im 360° Winkel und über die gesamte Höhe in die anderen Zonen aus und wird in einem äußeren Sammelraum gesammelt. Die Dicke der ersten Abtrennung wird so gewählt, dass der Druckverlust für eine gleichmäßige Verteilung hoch genug ist. Die Edukte für die Reaktion werden durch Rohrwendel, entgegen der Strömungsrichtung des Reformats, zugegeben. Die Luft wird durch die Eindüsung des Kraftstoffs durch einen Strahl-Ejektor angesaugt, was zu einem geringeren benötigten Druck führt. Der Betrieb des Rohrwendelwärmeübertragers im Gegenstrom wirkt sich durch die niedrigeren Temperaturen am Austritt des WGS positiv auf die Umsetzung des Kohlenmonoxids aus. Neben dieser zylindrischen Variante wurden auch eine axial durchströmte und hemisphärische und sphärische Ausführungen patentiert. Durch den integrierten Gegenstromwärmeübertrager können die Edukte vorgewärmt und der Umsatz im WGS positiv beeinflusst werden. Die Strömung wird durch die erste Trennschicht homogenisiert und bleibt dann über die anderen Zonen hinweg homogen. Durch die sich radial ausbreitende Strömung wird die Geschwindigkeit von Zone zu Zone kleiner, was sich aufgrund der sinkenden Reaktionsgeschwindigkeiten bei niedrigeren Temperaturen positiv auswirkt.



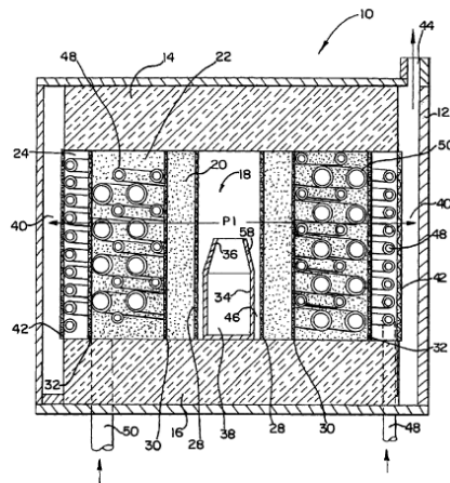


Abb. 3.18: Zylindrisches Packagekonzept mit radialer Durchströmung [70]

In [71] wurde ein Entwurf für ein Package basierend auf Dieselreformierung und einer Festoxidbrennstoffzelle vorgestellt. Der Reformer ist bei diesem Aufbau in der Mitte angeordnet. Der Kraftstoff und ein Teil des Anodenrestgases der Brennstoffzelle werden zuerst extern und anschließend mit Luft gemischt. Dieses Gemisch strömt durch einen Plattenwärmeübertrager in den Reformer. Auf der anderen Seite des Wärmeübertragers strömt das bereits teilweise abgekühlte Abgas des katalytischen Brenners. Bei der Festoxidbrennstoffzelle (SOFC) wird Wasser auf der Anode produziert. Ein Teil des Anodenrestgases wird wie bereits beschrieben dem Reformer zugeführt und der andere Teil wird dem Verbrennungsraum des Startbrenners zugeführt, indem sich auch Oxidationskatalysatoren befinden. Das heiße Gas strömt danach durch einen Rohrwendel- und dann durch den Plattenwärmeübertrager. Auf der anderen Seite des Rohrwendelwärmeübertragers strömt die Luft für die Kathodenseite im Gegenstrom. Bei dem Konzept von Ramschak [71] wurden verschiedene Ideen kombiniert. Das auf der Anode entstehende Wasser wird recycelt und für die Reformierung verwendet. Somit entfällt die Notwendigkeit eines Wasseranschlusses. Der Startbrenner wird in den katalytischen Brenner integriert, sodass Bauraum eingespart werden kann und der Wärmeübertrager von beiden Brennern genutzt wird. Es wurden verschiedene Wärmeübertrager verwendet. Der Rohrwendelwärmeübertrager sorgt für eine schnelle Aufheizung mit seiner geringen thermischen Masse. Weiterhin besitzt er eine hohe Temperaturbeständigkeit und einen geringen Druckverlust. Der Plattenwärmeübertrager hat einen besseren Wärmeübergang und toleriert jedoch eine geringere Temperaturdifferenz. Bisher wurden jedoch keine experimentellen Daten zu diesem Package veröffentlicht.

Von Isogawa et al. [72] wurde ein auf Dampfreformierung basierendes Brenngaserzeugungssystem vorgestellt und patentiert. Der Aufbau ist in Abbildung 3.19 gezeigt. Dieses Brenngaserzeugungssystem ist aus einem Verdampfungs-, einem Reformierungs- und einem Kohlenmonoxidreduktionsbereich aufgebaut. Die Bauform des Brenngaserzeugungssystems ist für ein Fahrzeug optimiert. Es wird angegeben, dass das horizontale Platzangebot für den Einbau größer ist, als das vertikale.

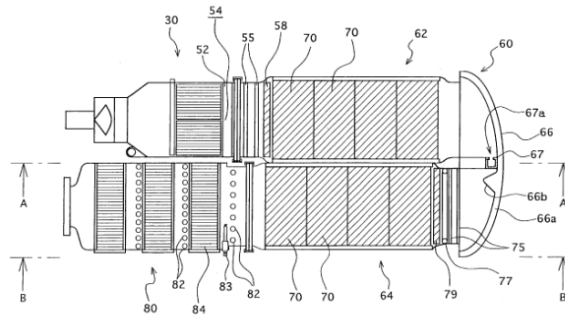


Abb. 3.19: Brenngaserzeugungspackage für Methanol [72]

Die drei Bereiche sind bei diesem Package seriell mit einer Umlenkung im Reformatbereich verschaltet. Im Verdampfungsbereich findet eine Eindüsung und Erwärmung von Kraftstoff statt. Dieser wird zusammen mit Luft in einem, in dem integrierten Wärmeübertrager angebrachten, Katalysator verbrannt. Methanol und Wasser werden vermischt und anschließend auf der anderen Seite des Wärmeübertragers im Gegenstrom verdampft. Diese Gase strömen anschließend in den Reformerteil, der in einen vorderen und hinteren Teil eingeteilt ist, die durch eine Umlenkung miteinander verbunden sind. Die Gasnachbehandlung ist durch wiederholende Paare von Luftzuleitungen und katalysatorbeschichteten Wärmeübertragern aufgebaut. Der selektive Oxidationskatalysator oxidiert Kohlenmonoxid mit einer höheren Priorität als Wasserstoff. Die durch die exotherme Reaktion entstehende Wärme wird in den Wärmeübertragern an die Edukte für die Reformierung übertragen. Dieses Konzept ist speziell für einen Einbaufall optimiert, bei dem in eine Einbaurichtung mehr Platz zur Verfügung steht. Auf zusätzliche Rohrleitungen kann bei diesem Konzept ebenfalls verzichtet werden und durch die Anordnung können kurze Wege zwischen dem Wärmeübertrager im Katalytbrenner und der Mischkammer realisiert werden.

Severin et al. [55] haben eine auf Benzin basierende APU entwickelt. Der experimentelle Prototyp kommt bei einer thermischen Leistung von 3 bis 9 kW auf ein Volumen von 40 l. Der größte Volumenanteil entfällt bei diesem Prototyp auf den Leerraum. Basierend auf diesem Prototyp wurde ein neues Packagekonzept entwickelt. Dieses ist in Abbildung 3.20 (links) dargestellt. Diesem Konzept liegen zwei spezielle Ideen zu Grunde. Die Katalysatoren werden rechteckig ausgeführt und die Verbindungsstücke werden für chemische oder thermodynamische Zwecke verwendet. Durch die rechteckige Bauform der Katalysatoren können diese wesentlich dichter

ter aneinander angeordnet werden. Die Verwendung der Verbindungsstücke führt weiterhin zu einer Platzeinsparung. In die Verbindung zwischen Reformer und Hochtemperatur-Shiftstufe wurde ein Wärmeübertrager integriert. Dieser ist in Abbildung 3.20 (rechts) dargestellt. Durch diese Änderungen konnte bei gleichem Katalysator- und Mischkammervolumen und gleicher Oberfläche der Wärmeübertrager eine Volumenreduktion von annähernd 70 % auf 13 Liter erreicht werden. Das Gesamtvolumen inklusive Stack und Luftversorgung beträgt damit 44 l.

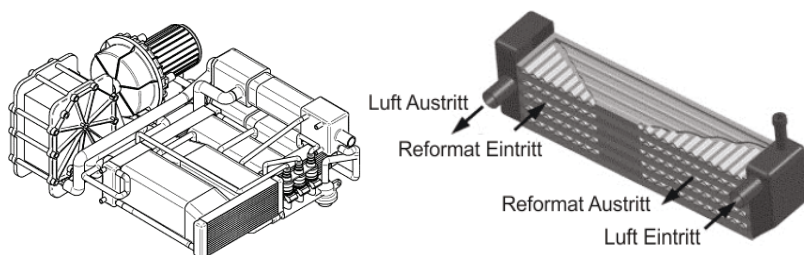


Abb. 3.20: Packagekonzept (links) und Gegenstromwärmeübertrager (rechts) [55]

In [73] wurde ein HT-PEFC-System mit Erdgasreformierung vorgestellt. Das 3D-Modell des Systems ist in Abbildung 3.21 dargestellt. Die Brenngaserzeugungskomponenten sind hier ebenfalls quadratisch aufgebaut. Das Brenngaserzeugungssystem besteht aus einem autothermen Reformer und zwei Shiftstufen. Es ist für eine thermische Leistung von 5 bis 25 kW ausgelegt. Die Brenngaserzeugungskomponenten liegen waagrecht im Package. Die Brennstoffzelle ist seitlich neben dem Brenngaserzeugungssystem angeordnet. Durch die quadratische Bauweise können die einzelnen Reaktoren sehr kompakt nebeneinander angeordnet werden. Die gleichmäßige Verteilung ist jedoch bei quadratischen Querschnitten wesentlich schwieriger als bei runden Querschnitten.

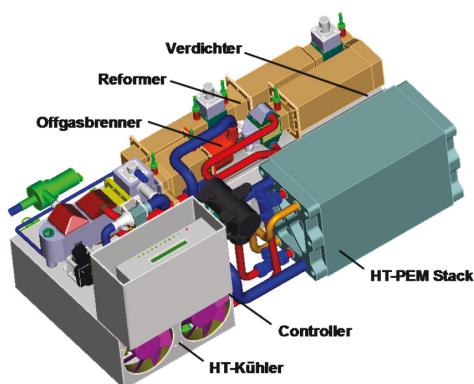


Abb. 3.21: Packagekonzept für ein HT-PEFC-System mit Erdgas als Eduktgas [73]

Weitere Brenngaserzeugungspackages werden in [67, 74, 75] vorgestellt. Die diesen Packages zugrunde liegenden Ideen werden durch die hier vorgestellten Packages bereits abgedeckt. Auf den genauen Aufbau dieser Packages soll deshalb hier nicht eingegangen werden.

Der zylindrische Aufbau des Brenngaserzeugungspackages ist aufgrund der erwähnten Vorteile sehr vielversprechend für ein Brenngaserzeugungssystem. Nachteilig ist, dass nur im Reformier eine mittige Eindüsung möglich ist. Bei dem aktuellen System wird jedoch eine Wassereindüsung zwischen den beiden Wassergasshiftreaktorstufen eingesetzt, um die Gase zu kühlen. Die Katalysatoren müssen bei einem zylindrischen Aufbau alle zurechtgeschnitten werden, wobei gegebenenfalls ein hoher Verschnitt anfällt. Das Konzept der viereckigen Reaktoren ist auf das aktuelle System kaum übertragbar. Durch den viereckigen Querschnitt ist eine gleichmäßige Strömungsverteilung schwierig zu realisieren. Außerdem treten in dem viereckigen Aufbau höhere Spannungsgradienten auf. Eine Anordnung, die aus verschiedenen Reaktoren besteht, ist am einfachsten zu realisieren. Hierbei ist darauf zu achten, dass die Rohrleitungen möglichst kurz sind. Bei diesem System können die Komponenten schnell und unkompliziert ausgetauscht werden. Die kompakte Bauform des zylindrischen Konzepts wird durch eine Anordnung mehrerer Reaktoren nicht erreicht. In der Literatur sind keine Versuchsergebnisse zu zylindrischen Brenngaserzeugungssystemen veröffentlicht. Um ein solches System aufbauen zu können, müssen alle Komponenten bekannt und langfristig stabil betreibbar sein. Weiterhin müssen vor der Konstruktion eines solchen Packages die Einflüsse der verschiedenen Reaktionsbereiche untereinander näher betrachtet und optimiert werden. Bei den zylindrischen Packages ist eine genaue Kenntnis der Temperaturprofile in den Reaktoren entscheidend, da durch die kompakte Bauweise viele Steuerungsmöglichkeiten entfallen. Aus diesen Gründen wird im Rahmen dieser Arbeit ein Package entwickelt, welches aus einer kompakten Anordnung verschiedener Reaktoren besteht. Für dieses Package sollen die benötigten Startkomponenten entwickelt werden. Diese müssen anschließend getestet und in das Package integriert werden. Im Rahmen dieser Arbeit wird weiterhin eine Methodik für die dreidimensionale strömungsmechanische Berechnung eines Packages entwickelt.

## 3.5 Ableitung der Arbeitsschwerpunkte

In den vorherigen Abschnitten wurde der Stand der Technik dargestellt. Daraus werden die Arbeitsschwerpunkte für diese Arbeit abgeleitet. Diese teilen sich in die Themen Anfahrstrategie, Hybridisierung und Packaging auf. Diese drei Themen müssen vernetzt betrachtet werden.

Bei der Simulation des Aufheizvorgangs für das Brenngaserzeugungssystem muss sowohl ein dynamisches Systemmodell, als auch ein strömungsdynamisches Modell für den Startvorgang entwickelt werden. Weiterhin müssen Experimente hinsichtlich des Startvorgangs durchgeführt werden, um die erstellten Modelle zu validieren. Hierfür müssen die experimentell aufgenommenen und simulierten Temperaturverläufe gegenübergestellt und verglichen werden. Anschließend werden mit diesem Modell unterschiedliche Aufheizvorgänge simuliert und hinsichtlich ihrer Aufheizzeit und ihres Energieverbrauchs bewertet. Die beiden Modelle geben auf

unterschiedlichen Ebenen Aufschluss über den Startvorgang. Das dynamische Systemmodell gibt Aufschluss über das gesamte Brennstoffzellensystem, während das strömungsdynamische Modell einen detaillierteren Einblick in das Brenngaserzeugungssystem erlaubt. Mit diesen Modellen muss ein Startvorgang entwickelt und optimiert werden. Für die Umsetzung des Startvorgangs durch die Verwendung des Startbrenners muss der Startbrenner näher charakterisiert werden. Hierfür müssen weitere Versuche durchgeführt werden. Im Anschluss daran muss ein Wärmeübertragerkonzept entwickelt werden. Dieses Konzept muss anschließend entsprechend der Anforderungen des Brennstoffzellensystems simuliert werden. Für einen elektrischen Startvorgang des Systems muss eine Möglichkeit gefunden werden, den Wasserdampf für den Startvorgang zu erzeugen.

Im Bereich des Themas der Hybridisierung muss das dynamische Systemmodell auf ein Hybrid-systemmodell erweitert werden. Mit diesem Modell werden die unterschiedlichen Verschaltungen für Hybridsysteme bewertet. So können die Vor- und Nachteile der passiven und aktiven Hybridsysteme untersucht werden. Weiterhin muss der Einfluss der Betriebsstrategie auf das Hybridsystem untersucht werden. Die entwickelte Anfahrstrategie fließt mit in die dynamische Simulation des Hybridsystems ein. Somit ist eine gemeinsame Simulation des Startvorgangs und des stationären Betriebes der Anwendung möglich. In diesem Bereich soll die Hybrid-architektur und die passende Betriebsstrategie für die Anwendung der Bordstromversorgung ausgewählt werden.

Beim Thema Packaging müssen die Reaktoren der Brenngaserzeugung möglichst kompakt angeordnet werden. Für diesen Zweck ist es notwendig, das Brenngaserzeugungspackage strömungsdynamisch simulieren zu können. Es muss eine Methodik für die stationäre und dynamische Simulation des Brenngaserzeugungssystems entwickelt werden. Weiterhin ist die Entwicklung und Simulation von Wärmeübertragern ein entscheidendes Thema im Bereich Packaging. Die Simulationsmethodik soll für einen Wärmeübertrager angewendet und validiert werden. Die entwickelten Startkonzepte sollen in diesem Bereich umgesetzt werden. Weiterhin soll die Simulation eines gesamten Packages durchgeführt werden.

Die Verknüpfung dieser einzelnen Bausteine wird in Kapitel 4, Methodik der Arbeit, näher beleuchtet.

## 4 Methodik der Arbeit

In diesem Kapitel wird die Methodik dieser Arbeit vorgestellt. Diese Methodik baut auf den in Kapitel 3.5 hergeleiteten Arbeitsschwerpunkten auf. Ein Überblick über die entwickelte Methodik ist in Abbildung 4.1 dargestellt. Bei dieser Methodik geht es um die Optimierung eines bestehenden Brennstoffzellensystems. In die Methodik fließen einerseits Erkenntnisse aus dem aktuellen System und andererseits die Anforderungen einer konkreten Anwendung ein.

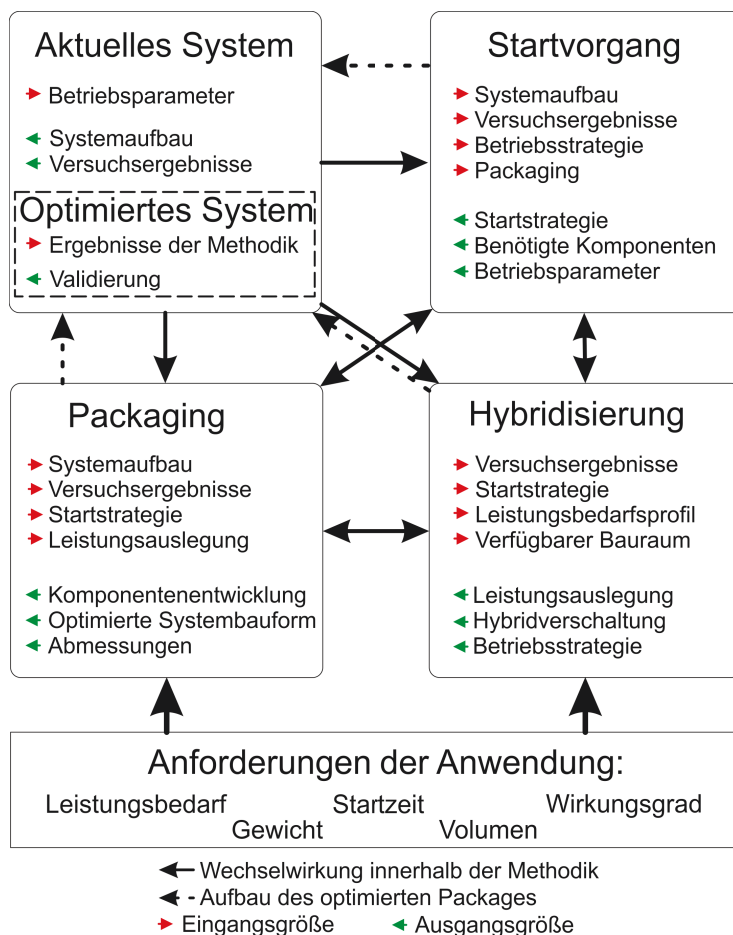


Abb. 4.1: Schematische Darstellung der Methodik der Arbeit

Die Brennstoffzelle ist meistens ein Substitutionsprodukt, welches mit anderen Technologien konkurrieren muss. Die Anforderungen sind für die verschiedenen Technologien identisch, können jedoch je nach Anwendung sehr unterschiedlich sein. Für mobile Anwendungen sind der Leistungsbedarf und die benötigte Energie, sowie das Gewicht und das Volumen wichtige Parameter. Weiterhin ist ein hoher Wirkungsgrad und eine kurze Startzeit entscheidend. Diese Bedingungen werden durch das aktuelle System nicht alle abgedeckt. Um diese Anforderungen zu erfüllen, muss das System hinsichtlich der drei Themen Startvorgang, Packaging und Hybridisierung optimiert werden. Die einzelnen Bereiche sind stark voneinander abhängig und überschneiden sich teilweise. Aus diesem Grund muss die Optimierung des Systems in diesen Themengebieten vernetzt durchgeführt werden. Das aktuelle System definiert den Systemaufbau für den stationären Zustand. Mit dem System durchgeführte Versuche dienen zur Parametrisierung der Modelle und zur Validierung der einzelnen Methoden. Die experimentellen Ergebnisse werden für alle drei Methodikbausteine verwendet. Für den Startvorgang sind neben diesen Daten die Betriebsstrategie des Hybridsystems und die Einschränkungen, die sich aus dem Packaging ergeben wichtig. Basierend auf diesen Daten wird eine Startstrategie entwickelt. Aus dieser Startstrategie folgen die zusätzlich für den Startvorgang benötigten Komponenten. Die Systemverschaltung für den stationären Zustand sollte nur geringfügig geändert werden. Im Besonderen ist darauf zu achten, dass der Druckverlust im stationären Zustand nicht deutlich ansteigt. Dies würde zu einer Reduzierung des Wirkungsgrades führen. Für den Startvorgang können unter Berücksichtigung der Gegebenheiten optimierte Betriebsparameter bestimmt werden. Die Startstrategie des Systems mit den dazugehörigen Betriebsparametern wird bei der Hybridisierung mit aufgegriffen. Aus dem Leistungsbedarfsprofil ergibt sich auch die Hybridverschaltung. Ausgehend von dem Leistungsbedarf der Anwendung wird die Auslegung der einzelnen Energiewandler und -speicher durchgeführt. Somit sind die Größe der Batterie und der Brennstoffzelle festgelegt. Diese Größen sind für das Packaging wichtig. Der Startvorgang muss bei der Dimensionierung mitberücksichtigt werden. Je nach Leistungsbedarf und maximaler Startzeit des Systems muss der passende Startvorgang ausgewählt werden. Die Dimensionierung der Batterie ist bei der Betrachtung der Betriebsstrategie entscheidend. Beim Packaging müssen die Komponenten für das System entwickelt werden. Die Anforderungen aus den anderen beiden Bausteinen müssen bei dieser Entwicklung mitberücksichtigt werden. Wie bei der Hybridisierung gibt es auch hier Randbedingungen, die durch die Anwendung vorgegeben werden. Mit den entwickelten Komponenten soll ein möglichst kompakter Systemaufbau durchgeführt werden. Bei der Entwicklung des Packages müssen der Druckverlust und die thermische Masse des Systems reduziert werden. Eine hohe thermische Masse wirkt sich sonst negativ auf den Startvorgang und ein hoher Druckverlust wirkt sich negativ auf den Wirkungsgrad aus. Die Abmessungen des Packages müssen die von der Anwendung vorgegebenen Rahmenbedingungen einhalten.

In den einzelnen Bausteinen kann es zu gegenläufigen Trends führen, so dass diese mehrmals durchlaufen und iterativ optimiert werden müssen. Die Ergebnisse dieser Optimierung fließen in die Entwicklung eines optimierten Systems ein, welches dann genutzt wird, um die Methodik zu validieren.

---

In dieser Arbeit werden thermodynamische Berechnungen, strömungsdynamische Simulationen und Gesamtsystems Simulationen durchgeführt. Die thermodynamischen Berechnungen werden durchgeführt, um die Funktion eines Konzeptes zu überprüfen. Diese Berechnungen geben jedoch keinen Aufschluss über die Ausführung oder die Dimensionierung der Apparate, zeigen aber auf, ob das Konzept theoretisch möglich ist. Weiterhin werden wenn möglich Berechnungsmethoden, wie die im VDI Wärmeatlas [76], verwendet. Diese Berechnungen können nur für den stationären Zustand durchgeführt werden. Sie dienen als Ausgangspunkt für die Auslegung einzelner Komponenten. Diese Konzepte werden dann in einer strömungsdynamischen Simulation überprüft. In dieser Simulation ist es möglich, die Einflüsse der einzelnen Bauteile detailliert zu untersuchen. So können die Einflüsse der Strömung auf den Wärmeübergang und die Druckverluste orts aufgelöst untersucht werden. In dieser Arbeit soll die strömungsdynamische Simulation auf ein Brenngaserzeugungspackage erweitert werden. Der Schwerpunkt der Arbeit liegt in diesem Bereich auf der dynamischen Aufheizsimulation des Systems, der Optimierung der Druckverluste und der kompakten Bauweise des Systems. Mit der Methodik soll der Startvorgang des Brenngaserzeugungspackages berechnet und optimiert werden können. Die Simulation des Brenngaserzeugungssystems wird neben den CFD-Simulationen durch eine dynamische Systemsimulation in Matlab/Simulink realisiert. Für diesen Zweck müssen Modelle für die einzelnen Komponenten entwickelt werden, die sich durch eine kurze Rechenzeit auszeichnen. Die Parametrisierung der Modelle kann sowohl durch Experimente, als auch durch die Ergebnisse der CFD-Simulationen erfolgen. Die letztere Methode bietet den Vorteil, dass auch Reaktoren simuliert werden können, die bisher nicht gebaut oder getestet wurden. In den Systemsimulationen kann dann der Einfluss des Startvorgangs auf das Hybridsystem näher untersucht werden. Weiterhin soll es mit diesem Modell möglich sein, die Betriebsstrategie für das Hybridsystem zu entwickeln. Im Bereich des Packagings wird es immer wichtiger gesamte Reaktoren bis hin zum gesamten Package gemeinsam zu modellieren. Mit zunehmender kompakter Bauweise nehmen die Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Reaktoren zu. Aus diesem Grund wird eine Vernetzungsmethodik entwickelt, mit der es möglich ist, komplette Packages zu berechnen. Die Erkenntnisse aus den Systemsimulationen und den CFD-Simulationen fließen in die Entwicklung eines neuen Systems ein.

In den folgenden Abschnitten wird die eingesetzte Methodik in den einzelnen Bausteinen näher erläutert.



## 4.1 Methodik strömungsdynamischer Simulationen (CFD)

Bei der Methodik der strömungsdynamischen Simulationen handelt es sich um ein ortsauflöses Berechnungsverfahren. Die zu berechnende Geometrie wird bei diesem Verfahren in viele kleine Kontrollvolumina eingeteilt. Diese werden als Gitter- oder Netzzellen bezeichnet. Es handelt sich um ein Berechnungsverfahren der finiten Volumen. In diesen Zellen werden dann die Massen-, die Impulserhaltungs- und die Energieerhaltungsgleichungen gelöst. Zusätzlich zu diesen Grundgleichungen können weitere Modelle zur Beschreibung der auftretenden Phänomene ausgewählt und gelöst werden. Bei diesen Berechnungen handelt es sich um ein iteratives Verfahren. In diesem Abschnitt werden zuerst die Grundgleichungen der Strömungsdynamik und der Lösungsansatz für diese Gleichungen vorgestellt. Danach wird auf die Erzeugung des Rechengitters und die physikalischen Modellgrundlagen der verwendeten Modelle eingegangen. Ein Ziel der strömungsdynamischen Simulationen in dieser Arbeit ist es, detaillierte Kenntnisse über das Aufheizverhalten des Brenngaserzeugungssystems zu gewinnen. Um die benötigte Rechenzeit möglichst gering zu halten, muss ein zweidimensionales Modell des Brenngaserzeugungssystems erstellt werden. Mit diesem Modell werden zeitaufgelöste Simulationen der einzelnen Komponenten durchgeführt. In diesem Modell muss der Wärmeübergang im porösen Medium und die Kopplung der einzelnen Reaktoren modelliert werden. Die verwendeten Modelle werden durch einen Abgleich der simulierten Verläufe mit experimentell ermittelten Werten validiert. Für die Komponentenentwicklung ist es notwendig gesamte Reaktoren dreidimensional simulieren zu können. Die Herausforderung liegt in diesem Fall darin, dass die Reaktoren ausreichend genau, aber mit einer möglichst kurzen Rechenzeit berechnet werden können. Diese Methodik soll dann auf ein Brenngaserzeugungspackage ausgeweitet werden.

### 4.1.1 Erhaltungsgleichungen der Strömungsdynamik

Die instationäre Erhaltungsgleichung für den Transport einer skalaren Größe  $\phi$  ist in Gleichung 4.1 in integraler Form gegeben. Der erste Term dieser Gleichung ist ein Akkumulationsterm, indem die zeitliche Änderung der skalaren Größe  $\phi$  berechnet wird. Die anderen Terme in dieser Gleichung sind ein Konvektionsterm und ein Leitungsterm und ein Term, der die Quellen berücksichtigt. [77]

$$\underbrace{\int_V \frac{\delta \rho \phi}{\delta t} dV}_{\text{Akkumulation}} + \underbrace{\int_A \rho \phi \vec{v} d\vec{A}}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{\int_A \Gamma_\phi \nabla_\phi d\vec{A}}_{\text{allg. Leitung}} + \underbrace{\int_V S_\phi dV}_{\text{Quellterme}} \quad (4.1)$$

Aus dieser Gleichung können die Massen-, die Impuls- und die Energiebilanz hergeleitet werden. Diese sind in den Gleichungen 4.2, 4.3 und 4.4 dargestellt. Diese Gleichungen wurden aus [77, S. 2f] entnommen. Die Massenerhaltungsgleichung setzt sich aus einem Akkumulationsterm, einem Konvektionsterm und einem allgemeinen Quellterm zusammen. In diesem wird auch die

entstehende Masse aus der diskontinuierlichen Phase durch Verdampfung berücksichtigt.

$$\underbrace{\frac{\partial p}{\partial t}}_{\text{Akkumulation}} + \underbrace{\nabla(\rho \vec{v})}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{S_m}_{\text{allg. Quellterm}} \quad (4.2)$$

Die Impulsgleichung lässt sich aus dem zweiten Newtonschen Gesetz herleiten. Die Akkumulation des Impulses setzt sich aus einem konvektiven Anteil, einer Druckänderung, viskosen Spannungen, der Gravitationskraft und externen Kräften zusammen. In dieser Gleichung stellt  $p$  den statischen Druck und  $\bar{\tau}$  den Spannungstensor dar. Durch diesen werden die Effekte der Reibung berücksichtigt. Das Produkt aus  $\rho$  und  $\vec{g}$  stellt die Gravitationskraft und  $\vec{F}$  eine externe Körperkraft dar.

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v})}_{\text{Akkumulation}} + \underbrace{\nabla(\rho \vec{v} \vec{v})}_{\text{Konvektion}} = - \underbrace{\nabla p}_{\text{Druckänderung}} + \underbrace{\nabla(\bar{\tau})}_{\text{Reibung}} + \underbrace{\rho \vec{g}}_{\text{Gravitationskraft}} + \underbrace{\vec{F}}_{\text{ext. Krafteinwirkung}} \quad (4.3)$$

Die Energiegleichung mit der Gesamtenergie  $e$  setzt sich neben dem Akkumulations- und dem Konvektionsterm aus einem Wärmeleitungs-, einem Diffusions-, einem Reibungs- und einem Reaktionsterm zusammen.

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho e)}_{\text{Akkumulation}} + \underbrace{\nabla(\vec{v}(\rho e + p))}_{\text{Konvektion}} = \nabla \left( \underbrace{k_{\text{eff}} \nabla T}_{\text{Wärmeleitung}} - \underbrace{\sum_j h_j \vec{J}_j}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{(\bar{\tau}_{\text{eff}} \cdot \vec{v})}_{\text{Reibung}} \right) + \underbrace{S_h}_{\text{Reaktionen}} \quad (4.4)$$

Diese Gleichungen sind die Grundgleichungen der Strömungsdynamik. Diese werden im Rahmen dieser Arbeit angewendet und um die benötigten Modelle erweitert. Im Folgenden wird zuerst auf die Bilanzierung und Lösung dieser Gleichungen, dann auf die Erstellung eines Rechengitters und anschliessend auf die zusätzlichen verwendeten Modelle näher eingegangen.

### 4.1.2 Bilanzierung der Erhaltungsgleichungen

Bei der Berechnung in Ansys Fluent wird eine Kontrollvolumentechnik benutzt. Diese basiert auf einer Einteilung des gesamten Gebiets in diskrete Kontrollvolumen durch ein Rechengitter. In den Kontrollvolumen werden die Gleichungen durch einen Integrationsansatz in algebraische Gleichungen überführt und gelöst. Bei dieser Methode wird der Diskretisierungsansatz der Finiten Volumen verwendet. In dieser Arbeit wird der druckbasierte Strömungslöser verwendet. Bei diesem wird das Geschwindigkeitsfeld basierend auf einer Druckgleichung ausgerechnet. Es gibt weiterhin die Auswahl zwischen dem segregierten und dem gekoppelten Löser. Der segregierte Löser benötigt weniger Arbeitsspeicher, da er die einzelnen Gleichungen hintereinander

löst. Zuerst wird die Momentengleichung gelöst und basierend darauf eine Druckkorrektur errechnet. Mit dieser Korrektur werden die Geschwindigkeit, der Druck und der Massenstrom angepasst und danach alle anderen Skalare berechnet. Dieser Vorgang wird so lange wiederholt, bis die Lösung konvergiert ist. Der gekoppelte Löser löst die Massen- und Impulsgleichungen gemeinsam und benötigt dadurch 1,5 bis 2 mal soviel Arbeitsspeicher für die Berechnung [77]. In dieser Arbeit wird aufgrund des geringeren Speicherbedarfs der segregierte Löser verwendet.

Die Diskretisierung von Gleichung 4.1 führt zur Gleichung 4.5. Mit dieser kann die Änderung der skalaren Größe  $\phi$  in der Zelle berechnet werden. Der konvektive Transport und der Transport durch Leitung werden auf den Flächen der Zelle bestimmt und aufsummiert.

$$\frac{\delta \rho \phi}{\delta t} V + \sum_f^{\text{alle Flächen}} \rho_f \phi_f \vec{v}_f d\vec{A}_f = \sum_f^{\text{alle Flächen}} \Gamma_\phi \nabla_{\phi_f} d\vec{A}_f + S_\phi V \quad (4.5)$$

Die Werte der Größe  $\phi$  auf den Oberflächen  $\phi_f$  müssen aus dem Wert der Zellmittelpunkte berechnet werden. Bei einem Verfahren erster Ordnung entspricht der Wert auf der Oberfläche dem im Zellmittelpunkt gespeicherten Wert. In Ansys Fluent wird ein *upwind*-Verfahren verwendet. Dadurch wird der Wert der Zelle verwendet, der sich stromaufwärts zur Fläche befindet. Bei dem Verfahren zweiter Ordnung wird dieser Wert aus dem gespeicherten Wert zuzüglich der örtlichen Änderung berechnet.

$$\underbrace{\phi_{f,2. \text{ Ordnung upwind}}}_{\text{Oberflächenwert}} = \underbrace{\phi}_{\text{Wert der Zelle}} + \underbrace{\nabla \phi \cdot \vec{r}}_{\text{Änderung}} \quad (4.6)$$

Die zeitliche Diskretisierung erfolgt bei dem gewählten druckbasierten Löser über ein implizites Lösungsverfahren. Bei diesem wird der Wert des Skalars für den nächsten Zeitschritt  $\phi^{n+1}$  aus dem existierenden Wert  $\phi^n$  und einer Funktion von  $\phi^{n+1}$  berechnet. Bei einem Verfahren zweiter Ordnung wird der neue Wert aus dem aktuellen und dem Wert des letzten Zeitschritts berechnet. Die Gleichungen werden bei der transienten Berechnung so lange iteriert, bis ein konvergierter Wert vorliegt. Dann wird zum nächsten Zeitschritt übergegangen.

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t \cdot F(\phi^{n+1}) \quad (4.7)$$

Vor der Rechnung muss eine Startlösung erzeugt werden. Dies geschieht durch eine Initialisierung. In dieser Arbeit wird zu diesem Zweck die hybride Initialisierung verwendet. Bei dieser wird zu Beginn die Laplace-Gleichung mit dem Geschwindigkeitspotential  $\varphi$  für das Geschwindigkeits- und Druckfeld gelöst. Alle anderen skalaren Werte werden auf den Mittelwert des Rechengebietes gesetzt. Durch eine geeignete Wahl der Startlösung reduziert sich die benötigte Anzahl an Iterationen bis zur konvergierten Lösung. Die Lösung einer stationären Berechnung wird als Startwert der transienten Berechnung verwendet.

$$\nabla^2 \varphi = 0 \quad (4.8)$$

### 4.1.3 Erzeugung eines Rechengitters

Am Anfang der strömungsdynamischen Simulation steht die Erstellung der Geometrie. In dieser Arbeit sollen CAD-Modelle der Reaktoren für die Berechnungen verwendet werden. Durch eine möglichst detailgetreue Simulation soll so sichergestellt werden, dass die Komponenten nach der Berechnung auch konstruiert und gefertigt werden können und die Abweichungen zwischen dem Experiment und der Simulation gering sind. Ein Beispiel der Geometrieaufbereitung ist in Abbildung 4.2 dargestellt. Die Ausgangsgeometrie ist im linken Teil der Abbildung dargestellt. Diese beinhaltet sowohl fertigungstechnisch relevante Bauteile wie Schweißnähte und einen Kompensator, der die Längenänderung ausgleichen soll, als auch gegebenenfalls Artefakte wie kleine Spalte oder kleine Flächen, die durch die Übertragung der Geometrie vom CAD-Programm in das Geometriewerkzeug der Ansys Workbench auftreten können. Diese führen in der Regel zu einem sehr feinen Netz oder einer schlechten Qualität des Netzes an der entsprechenden Stelle. Auf die Netzqualität wird an einer späteren Stelle eingegangen. Aus diesem Grund wird die Geometrie vor der Vernetzung kontrolliert und alle für die Simulation nicht relevanten Bauteile entfernt. Dazu gehört auch, dass Bauteile verbunden werden, die aufgrund der Toleranzen aus der Fertigungszeichnung eine gewisse Toleranz aufweisen. Die Geometrie, die so aus der CAD-Zeichnung erstellt wird, beinhaltet die Festkörper des Bauteils. Für die CFD-Simulation sind allerdings die Gasvolumina in der Regel wichtiger. Die vereinfachte Geometrie wird deshalb in einem weiteren Schritt ausgefüllt. Die durch dieses Verfahren entstehenden Körper repräsentieren das Fluidvolumen. Die fertig vereinfachte Geometrie, die auch schon mit dem Fluidvolumen ausgefüllt ist, ist im mittleren Teil der Abbildung dargestellt.

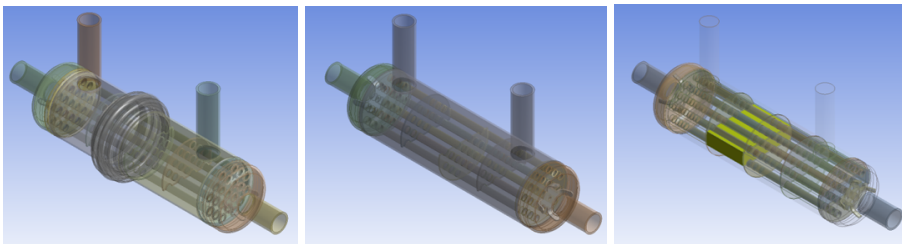


Abb. 4.2: Vorbereitung zur Vernetzung: Eingelesene CAD-Geometrie (links), vereinfachte Geometrie (mittig) und Einteilung der Geometrie zur besseren Vernetzung (rechts)

Diese Geometrie wäre so für eine Netzerstellung geeignet. Aus verschiedenen Gründen kann es jedoch vorteilhaft sein, die Geometrie weiter zu unterteilen. Für den Strömungslöser ist es entscheidend, dass in jedem Körper die selben Gleichungspakete gelöst werden. Falls ein Volumen ohne Einbauten und ein anderes als poröses Medium modelliert werden soll, dann ist dies bei der Geometrieerstellung zu berücksichtigen und für jedes Gebiet ein eigener Körper anzulegen. Weiterhin muss auch für jeden Feststoff ein eigener Körper angelegt werden, damit die richtigen Materialwerte zugewiesen werden können. Daraus wird deutlich, dass es wichtig ist, bereits am Beginn der Vorbereitung zu entscheiden, welche Bereiche und Phänomene simuliert werden sollen und wie die Geometrie dafür aufgeteilt werden muss. Ein weiterer Grund für die

Unterteilung der Geometrie kann die Vernetzungsmethode sein. Im rechten Teil der Abbildung 4.2 ist die Einteilung der Geometrie zum Vernetzen durch einen gelb hervorgehobenen Körper angedeutet. Auf den genauen Zusammenhang wird bei den Vernetzungsverfahren näher eingegangen.

Die Grundformen für die Rechengitter bilden Dreiecke und Vierecke. Bei zweidimensionalen Rechnungen wird aus ihnen das Rechengitter aufgebaut. Bei dreidimensionalen Rechnungen bilden diese Elemente das Oberflächengitter und das Volumengitter wird aus Körpern aufgebaut, die aus diesen Oberflächen gebildet werden können. Somit kommen als Volumenelemente Tetraeder, Prismen, Pyramiden und Hexaeder in Betracht. Die Tetraeder bieten den höchsten Automatisierungsgrad dieser Elemente. Mit Ihnen ist es möglich auch komplexe Geometrien zu vernetzen. Prismenschichten können bei der Tetraedervernetzung eingesetzt werden, um die Grenzschicht an der Wand feiner aufzulösen. Hexaeder hingegen bieten nur einen geringen Grad der Automatisierung. Diese bieten jedoch den Vorteil, dass bei einer gegebenen Kantenlänge weniger Elemente benötigt werden. Dies führt dann wiederum zu einer verkürzten Rechenzeit. Für die Vernetzung mit Hexaedern in Ansys Meshing gibt es zwei verschiedene Algorithmen. Einer dieser Algorithmen ist die Sweep-Methode. Für diese Methode muss der Körper vor der Vernetzung eingeteilt werden. Von dem Vernetzungsalgorithmus wird dann auf einer der Seiten des Körpers ein Oberflächengitter erstellt und diese Struktur wird dann durch den Körper gezogen. Bei dieser Methode sind sowohl Dreiecke, als auch Vierecke möglich und es werden dadurch Prismen mit der entsprechenden Grundseite gebildet. Gleichmäßige Prismenzellen entstehen bevorzugt bei sanften Übergängen der Querschnittsfläche. Diese Methode ist nur für stetige Querschnittserweiterungen anwendbar. Die zweite Methode ist die Vernetzung durch die Multizone-Methode. Diese Methode basiert auf einem Blocking-Ansatz. Bei diesem Ansatz werden Blöcke erstellt, deren Kanten mit Linien der Geometrie und deren Oberflächen mit Flächen in der Geometrie assoziiert werden. Diese erstellten Blöcke werden anschließend vernetzt und das Netz dann auf die Geometrie projiziert. Bei dieser Methode findet eine Vereinfachung der Geometrie statt. In Ansys Meshing ist es möglich diese verschiedenen Volumenelemente miteinander zu kombinieren. Die durch die Kombination entstehenden Netze werden als hybride Netze bezeichnet. Bei der hybriden Vernetzung wird ein Körper beispielsweise durch Tetraeder und ein anderer durch Hexaeder vernetzt.

Weiterhin gibt es konforme und nicht-konforme Grenzflächenvernetzung. Bei der konformen Grenzflächenvernetzung liegen die Knotenpunkte der beiden benachbarten Körper aufeinander. Bei nicht-konformen Grenzflächen unterscheiden sich die Knotenpunkte. Bei der späteren Berechnung muss zwischen den Knotenpunkten interpoliert werden. Die Schnittmenge der beiden benachbarten Körper wird dann zu einer internen Grenzfläche. Bei der Version 14.5 von Fluent wird für die Bestimmung der Grenzfläche ein Virtueller-Polygon-Ansatz gewählt. Bei diesem Ansatz werden die Knotenpunkte nicht verschoben. Es werden der Mittelpunkt und die Fläche des Polygons ermittelt und gespeichert. Diese werden für die anschließende Interpolation genutzt. Die Verwendung von konformen Grenzflächen bietet den Vorteil, dass zwischen den beiden Körpern nicht interpoliert werden muss. Bei hybriden Gittern ergibt sich an den Übergängen von einem Elementtyp zu einem anderen immer das Problem des Übergangs. Ist

der erste Körper durch Hexaeder vernetzt, besitzt er ein viereckiges Oberflächennetz. Um den benachbarten Körper mit Tetraedern vernetzen zu können, muss der Übergang von diesem viereckigen Oberflächennetz auf Dreiecke hergestellt werden. Für diesen Fall ist in den Tetraederalgorithmus ein Algorithmus eingebaut, der auf der Oberfläche eine Schicht Pyramiden erzeugt. Diese besitzen genau eine viereckige Grundfläche und ansonsten nur Dreiecksflächen, sodass nach dieser Schicht die Tetraederzellen folgen können. Ein Übergang von Tetraedern zu Hexaedern ist andererseits nicht möglich. Bei der Vernetzung ist es damit wichtig, welches Element zuerst erzeugt wird. Dies wird auch als sequentielle Vernetzung bezeichnet. Neben der Vernetzung der einzelnen Bauteile gibt es auch die Möglichkeit der Assembly-Vernetzung. Bei dieser Methodik wird eine Box um das Bauteil erstellt. Diese wird dann anhand der eingestellten Werte in kleinere Boxen unterteilt. Diese kleineren Boxen werden dann entsprechend der Anforderungen an die Größe der Zellen an den einzelnen Oberflächen in ihrer Kantenlänge halbiert, bis die Anforderung erfüllt ist, oder die maximale Anzahl an Verkleinerungsschritten erreicht ist. Diese Methode wird beim Ansys Meshing als CutCell Vernetzung bezeichnet und ist nicht mit der Vernetzung der einzelnen Komponenten kompatibel.

Für die Vernetzung der Geometrie existieren in der Ansys Workbench neben dem Standardwerkzeug Ansys Meshing, das Vernetzungsprogramm ICEM CFD und seit der Version 14.5 von Ansys auch die Vernetzung innerhalb von Fluent ("Fluent Meshing"). Jedes dieser Programme bietet seine Besonderheiten. Das Programm ICEM CFD ist besonders gut für die vollständige Hexaedervernetzung geeignet. Diese basiert auf der Blocking Methode. Im Gegensatz zur Multizone Methode aus Ansys Meshing erfolgt hier die Erstellung der Blöcke und die Assoziierung auf die Geometrie manuell. Dadurch, dass die Blöcke von Hand erstellt werden, können auch mäßig komplexe Geometrien durch Hexaeder vernetzt werden. Bei sehr komplexen Geometrien muss aber ebenfalls auf die Vernetzung mit Tetraedern zurückgegriffen werden. Durch das einmal erstellte Blocking kann ein neues Netz sehr schnell erzeugt werden. Der Zeitaufwand um dieses Blocking zu erstellen ist jedoch bei komplexeren Geometrien deutlich höher als der Aufwand bei der Tetraedervernetzung. Dieser Aufwand lohnt sich, wenn nur geringfügige Änderungen an der Geometrie durchgeführt werden und die Blöcke nur geringfügig an die neue Geometrie anpassen müssen. Für ständig wechselnde Komponenten wird der Aufwand in dieser Arbeit als zu hoch betrachtet. Die Vernetzung innerhalb von Fluent ist seit der Version 14.5 vorhanden und basiert auf der vorherigen Anwendung T-Grid. Bei dieser Vernetzung ist es möglich, lokale Größenfunktionen anzugeben. Es ist damit möglich für ein einzelnes Bauteil den maximalen Krümmungswinkel der Zellen anzugeben. Dies ist beim Ansys-Meshing nur global für alle Bauteile möglich. Diese Vernetzung bietet außerdem Möglichkeiten um schnell aus CAD-Dateien ein Netz zu erzeugen. Somit ist sie sehr gut für oft wechselnde Geometrien geeignet. Ein Nachteil dieser Vernetzung ist die fehlende Kompatibilität mit der Hexaedervernetzung. Es ist möglich, ein Rechengitter mit einem Hexaederkern zu erzeugen, aber nicht einzelne Komponenten komplett mit Hexaedern zu vernetzen, wie es beim Sweepen möglich ist. Aus den hier genannten Gründen wird in dieser Arbeit Ansys-Meshing für die Vernetzung der einzelnen Bauteile verwendet.

Ein Bewertungskriterium für die Qualität des Rechnetzes ist die Verformtheit des Netzes

(“Skewness”). Diese wird für Vierecke, Hexaeder, Prismen und Pyramiden aus dem Maximum einer Winkelbeziehung gebildet. Die Verformtheit nimmt Werte zwischen null und eins an und steigt mit der Abweichung vom Winkel eines gleichseitigen Grundkörpers. In [78] werden Bereiche für die Verformtheit angegeben. Skewness-Werte von 0,80 bis 0,94 gelten noch als akzeptabel und Werte oberhalb von 0,95 sollten vermieden werden. Die Skewness wird im Vernetzungswerkzeug für jede einzelne Zelle angegeben. So ist es möglich sich die Bereiche mit einer schlechten Qualität anzeigen zu lassen und zu versuchen, die Qualität an diesen Stellen, durch eine Veränderung der Geometrie oder der lokalen Größenfunktionen zu verbessern. Neben der Qualität ist auch die Größe der einzelnen Zellen entscheidend. Ob die Gittergröße fein genug ist, und die Lösung unabhängig von dem Rechennetz ist, wird in einer Netzanalyse gezeigt.

In diesem Abschnitt wurde die Erzeugung des Rechengitters erklärt. In den nächsten Abschnitten werden die in dieser Arbeit verwendeten Modelle vorgestellt. Diese sind eine Erweiterung der Grundgleichungen und müssen je nach den auftretenden Phänomenen ausgewählt werden.

#### 4.1.4 Physikalische Modellgrundlagen

Neben den Grundgleichungen der Strömungsmechanik gibt es eine Vielzahl an weiteren Modellen, die die auftretenden physikalischen Phänomene beschreiben sollen. Zu den in dieser Arbeit verwendeten Modellen gehören das  $k-\epsilon$  Turbulenzmodell, ein Oberflächenstrahlungsmodell, ein Modell für Stoffgemische und Reaktionen, ein Modell für poröse Medien und ein Mehrphasenströmungsmodell. Auf die Grundlagen dieser Modelle wird im Folgenden genauer eingegangen.

##### 4.1.4.1 Turbulenz

Bei den strömungsdynamischen Simulationen in dieser Arbeit werden die Mittelwerte der einzelnen Zellen berechnet. Für die Mittellung der einzelnen Größen wird die Geschwindigkeit in einen mittleren und einen fluktuierenden Anteil aufgeteilt.

$$\phi = \underbrace{\bar{\phi}}_{\text{gemittelter Wert}} + \underbrace{\phi'}_{\text{Fluktuation}} \quad (4.9)$$

Durch Einsetzen von Gleichung 4.9 in die allgemeine Massen- und Impulserhaltungsgleichung und Mittellung der Gleichungen entstehen die Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS) Gleichungen 4.10 und 4.11. Die fluktuierenden Anteile zeichnen sich dadurch aus, dass sie gemittelt null ergeben. Dies ist jedoch bei Produkten von Fluktuationsgrößen nicht der Fall. Somit bleibt ein Term in der Impulserhaltungsgleichung stehen, der von Fluktuationsgrößen abhängig ist. Dieser Term wird als Reynoldsscher Spannungstensor bezeichnet und muss modelliert werden, um die Gleichung 4.11 zu lösen. Bis auf den Reynoldsschen Spannungstensor sind alle Werte in den beiden Gleichungen gemittelte Werte.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j}(-\rho \overline{u'_i u'_j}) \quad (4.11)$$

Für die Schließung von Gleichung 4.11 werden sogenannte Turbulenzmodelle verwendet. Eins dieser Modelle ist das  $k$ - $\epsilon$ -Modell. Dieses Modell ist ein Zweigleichungsmodell bei dem Erhaltungsgrößen für die turbulente kinetische Energie  $k$  und die Dissipationsrate  $\epsilon$  gelöst werden. Diesem Modell liegt die Annahme zu Grunde, dass die Strömung ausgebildet turbulent ist. Die Transportgleichungen des  $k$ - $\epsilon$ -Modells sind in den Gleichungen 4.12 und 4.13 gegeben.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \epsilon - Y_M + S_k \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \epsilon u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} (G_k + C_{3\epsilon} G_b) - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k} + S_\epsilon \quad (4.13)$$

Die turbulente Viskosität, die in Gleichung 4.11 den Term mit den Fluktuationsgrößen ersetzt, wird bei diesem Modell aus beiden Größen nach Gleichung 4.14 errechnet.

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (4.14)$$

$G_k$  und  $G_b$  repräsentieren die erzeugte turbulente kinetische Energie durch Geschwindigkeitsgradienten und durch Auftriebskräfte.  $Y_M$  gibt den Effekt der Dissipation durch Ausbreitung der Strömung wieder. Die Werte des Standard- $k$ - $\epsilon$ -Modells sind  $C_{1,\epsilon} = 1,44$ ,  $C_{2,\epsilon} = 1,92$ ,  $C_\mu = 0,09$ ,  $\sigma_k = 1,0$  und  $\sigma_\epsilon = 1,3$ . Diese Werte wurden aus Experimenten mit grundlegenden turbulenten Strömungsphänomenen bestimmt. Zu diesen Versuchen gehörten Scherströmungen wie Grenzschichtströmungen, vermischende Strömungen und Freistahlströmungen. Eine Erweiterung des  $k$ - $\epsilon$ -Modells ist das  $k$ - $\epsilon$ -Realizable Modell. Dieses unterscheidet sich vom Standard- $k$ - $\epsilon$ -Modell durch eine andere Formulierung der turbulenten Viskosität und einer modifizierten Transportgleichung für die Dissipationsrate. Diese wurde aus einer exakten Gleichung für den Transport des Effektivwertes der Verwirbelung hergeleitet. Dieses Modell wird im Rahmen dieser Arbeit für die Schließung des Gleichungssystems verwendet.

#### 4.1.4.2 Wärmeübergang und Strahlung

Die Erhaltungsgleichung für die Energie ist in Gl. 4.4 angegeben. Die Wärmeübertragung durch Konvektion und Wärmeleitung sind in dieser Gleichung direkt berücksichtigt. Die zeitliche Änderung der Energie wird weiterhin durch die Diffusion, die Reibung und einen Quellterm bestimmt. Die effektive Leitfähigkeit des Materials wird durch  $k_{eff}$  angegeben und der effektive



Spannungstensor durch  $\bar{\bar{\tau}}_{eff}$ .

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho e)}_{\text{Akkumulation}} + \underbrace{\nabla(\vec{v}(\rho e + p))}_{\text{Konvektion}} = \nabla \left( \underbrace{k_{eff} \nabla T}_{\text{Wärmeleitung}} - \underbrace{\sum_j h_j \vec{J}_j}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{(\bar{\bar{\tau}}_{eff} \cdot \vec{v})}_{\text{Reibung}} \right) + \underbrace{S_h}_{\text{Reaktionen}} \quad (4.15)$$

Der Einfluss der Wärmestrahlung wird durch ein zusätzliches Strahlungsmodell berücksichtigt. In Fluent stehen verschiedene Modelle zur Auswahl. In dieser Arbeit wird das S2S (“Surface to Surface”)-Strahlungsmodell verwendet. Dieses Modell beschreibt die Energieübertragung durch Strahlung zwischen “grauen” Strahlungsoberflächen. Die Energieübertragung zwischen zwei Flächen hängt von der Oberfläche, dem Abstand der zwei Flächen und der Orientierung ab. Die Hauptannahme des S2S-Modells ist, dass Absorption, Emission und Strahlungsablenkungen im Fluid vernachlässigt werden können. Dies ist für den hier betrachteten Fall zutreffend, da die elementaren Gase wie beispielsweise  $O_2$ ,  $N_2$  und  $H_2$  nicht am Strahlungsaustausch teilnehmen [76, Kc1]. Somit wird nur der Austausch zwischen den Wänden modelliert. Für die grauen Oberflächen sind Emission und Absorption unabhängig von der Wellenlänge und nach dem Kirchhoff’schen Gesetz gleich groß.

Der Energiestrom, der eine Oberfläche verlässt, setzt sich aus der emittierten und der reflektierten einfallenden Strahlung zusammen. Die Energie, die von der Oberfläche  $k$  ausgesendet wird, ist damit

$$q_{aus,k} = \underbrace{\epsilon_k \sigma T_k^4}_{\text{Emittierte Strahlung}} + \underbrace{\rho_k q_{ein,k}}_{\text{Reflektierte einfallende Strahlung}} \quad (4.16)$$

In dieser Gleichung treten der Emissionskoeffizient  $\epsilon_k$ , die Boltzmann-Konstante  $\sigma$  und der Reflektionskoeffizient  $\rho_k$  auf. Das Verhältnis zwischen der bei der Fläche  $k$  ankommenden Strahlung und der von der Fläche  $j$  ausgesendeten Strahlung beschreibt der Einstrahlungsfaktor  $F_{j,k}$ . Die eintretende Energiemenge  $q_{in,k}$  kann durch Umformung mittels der Beziehung  $A_j F_{j,k} = A_k F_{k,j}$  zu Gl. 4.17 berechnet werden.

$$A_k q_{ein,k} = \sum_{j=1}^N F_{k,j} q_{aus,j} \quad (4.17)$$

Somit ergibt sich die ausgesendete Wärmestrahlung zu:

$$q_{aus,k} = \epsilon_k \sigma T_k^4 + \rho_k \sum_{j=1}^N F_{k,j} q_{aus,j} \quad (4.18)$$

Der Einstrahlfaktor ergibt sich für zwei Flächen aus

$$F_{jk} = \frac{1}{A_j} \int_{A_j} \int_{A_k} \frac{\cos\theta_j \cos\theta_k}{\pi r^2} \delta_{jk} dA_j dA_k \quad (4.19)$$

Der Faktor  $\delta_{jk}$  wird durch die Sichtbarkeit der Flächen bestimmt. Dieser Faktor ist 1, falls  $dA_k$  sichtbar für  $dA_j$  ist, und sonst 0. Wenn die Strahlung der Gase mitberücksichtigt werden soll, muss das *discrete ordinates Modell (DO-Modell)*, wie es von Scharf [25] benutzt wurde, verwendet werden. Bei diesem Modell werden nicht einzelne Strahlen anhand der Einstrahlfaktoren verfolgt, sondern es werden Transportgleichungen für die Strahlungsintensität gelöst.

#### 4.1.4.3 Stoffgemische und Reaktionen

Um Stoffgemische zu beschreiben, müssen für die einzelnen Komponenten Erhaltungsgleichungen gelöst werden. Dies geschieht in Fluent durch die Aktivierung des *species transport*-Modells. Bei diesem Modell werden bei N Komponenten N-1 Erhaltungsgleichungen für den Massenanteil gelöst. Der Massenanteil der N-ten Komponente wird durch eine Schließungsbedingung gelöst. Die Erhaltungsgleichung für den Massenanteil ist in Gleichung 4.20 angegeben. Die zeitliche Änderung setzt sich aus Konvektion, Diffusion, Reaktionen und einem Quellterm zusammen. Die Diffusion  $J_i$  wird durch einen Fick'schen Ansatz modelliert. [77, S. 197]

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i)}_{\text{Akkumulation}} + \underbrace{\nabla(\rho \vec{v} Y_i)}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{-\nabla \vec{J}_i}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{R_i}_{\text{Reaktionen}} + \underbrace{S_i}_{\text{Quellterm}} \quad (4.20)$$

Der Reaktionsterm ergibt sich aus dem Produkt aus der Molmasse von Komponente i und der Summe der Stoffmengenänderungen der einzelnen Reaktionen.

$$R_i = M_{w,i} \sum_{r=1}^{N_R} \hat{R}_{i,r} \quad (4.21)$$

Für eine Bruttoreaktionsgleichung der Form 4.22 ergibt sich für eine Hinreaktion eine Stoffmengenänderung nach Gleichung 4.23. Bei der Reaktionsmodellierung gibt es in Fluent drei verschiedene Modelle zur Auswahl. Das *laminar finite-rate* Modell modelliert die Reaktion über einen Arrhenius-Ansatz. Der Einfluss der Turbulenz wird vernachlässigt. Beim *eddy-dissipation* Modell wird hingegen der Arrhenius Ansatz vernachlässigt und der Einfluss der Turbulenz berücksichtigt. Bei dem *eddy-dissipation-concept* Modell fließen der Arrhenius-Ansatz und die Turbulenzbetrachtung in die Berechnung der Reaktionsraten ein. Die Reaktionsgeschwindigkeit  $k_{f,r}$  wird für den Fall des *laminar finite-rate* Modells durch einen Arrheniusansatz nach

Gleichung 4.24 berechnet.

$$\sum_{i=1}^N \nu'_{i,r} M_i \stackrel{k_{f,r}}{\rightleftharpoons} \sum_{i=1}^N \nu''_{i,r} M_i \quad (4.22)$$

$$\hat{R}_{i,r} = \Gamma \left( \nu''_{i,r} - \nu'_{i,r} \right) \left( k_{f,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{(\eta'_{j,r} + \eta''_{j,r})} \right) \quad (4.23)$$

$$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-\frac{E_r}{RT}} \quad (4.24)$$

In dieser Gleichung ist  $A_r$  der präexponentielle Faktor,  $\beta_r$  der Temperaturexponent und  $E_r$  die Aktivierungsenergie. Für eine Gleichgewichtsreaktion ergibt sich die Stoffmengenänderung analog nach Gl. 4.25. Die Reaktionsgeschwindigkeit der Rückreaktion  $k_{b,r}$  ergibt sich aus der Geschwindigkeit der Hinreaktion und der Gleichgewichtskonstante  $K_r$ .

$$\hat{R}_{i,r} = \Gamma \left( \nu''_{i,r} - \nu'_{i,r} \right) \left( k_{f,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\eta'_{j,r}} - k_{b,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\eta''_{j,r}} \right) \quad (4.25)$$

$$k_{b,r} = \frac{k_{f,r}}{K_r} \quad (4.26)$$

$$K_r = \exp \left( \frac{\Delta S_r}{R} - \frac{\Delta H_r}{RT} \right) \left( \frac{p_{atm}}{RT} \right)^{\sum_{i=1}^N (\nu''_{i,r} - \nu'_{i,r})} \quad (4.27)$$

Der Schwerpunkt der Arbeit liegt auf der simulationsunterstützten Optimierung des Systems. Die genaue Modellierung der Kinetik der Reformierung ist für die Optimierung der Reaktoren nicht notwendig und würde zu einer deutlich höheren Rechenzeit führen. Aus diesen Gründen werden in dieser Arbeit die Reaktionen wenn möglich abweichend von diesem Ansatz durch Quellterme berücksichtigt. Eine Betrachtung der Kinetik wird nur durchgeführt, wenn eine Modellierung durch eine vorgegebene Stöchiometrie zu großen Abweichungen führen würde.

#### 4.1.4.4 Poröse Medien

Die Struktur des Monolithen wird in den CFD-Simulationen durch einen porösen Körper angenähert. Poröse Medien werden in Fluent durch einen zusätzlichen Quellterm in der Impulsgleichung berücksichtigt. Der Quellterm beschreibt die Wechselwirkung zwischen der Fluid- und der Feststoffphase und besteht aus zwei Termen. Der erste Term beschreibt die viskosen Verluste. Der Druckverlust ist in diesem Bereich linear von der Geschwindigkeit der Strömung und der Viskosität abhängig. Wird nur der erste Teil des Quellterms berücksichtigt und Konvektion und Diffusion vernachlässigt, ergibt sich daraus das Darcygesetz. Dieses ist für laminare Strömungen gültig. Der zweite Term hingegen ist vom Quadrat der Geschwindigkeit und einem Beiwert  $C$  abhängig. Dieser Term dominiert den Druckverlust bei turbulenten Strömungen mit hohen Strömungsgeschwindigkeiten.

$$S_i = - \left( \underbrace{\sum_{j=1}^3 D_{ij} \mu v_j}_{\text{Darcy, viskose Verluste}} + \underbrace{\sum_{j=1}^3 C_{ij} \frac{1}{2} \rho |v| v_j}_{\text{Trägheitsverluste}} \right) \quad (4.28)$$

Für den Fall eines homogenen porösen Materials ergibt sich der Quellterm zu

$$S_i = - \left( \frac{\mu}{\alpha} v_i + C_2 \frac{1}{2} \rho |v| v_i \right) \quad (4.29)$$

Die Matrix  $D_{ij}$  lässt sich durch eine Diagonalmatrix mit der Reziproken der Permeabilität auf der Diagonalen darstellen. Alle anderen Einträge der Matrix sind 0. Dasselbe gilt für die Matrix  $C_{ij}$  mit dem Eintrag  $C_2$  auf der Diagonalen. Diese Kennwerte lassen sich aus Experimenten bestimmen. Die Kennwerte der verwendeten porösen Körper wurden in [25] untersucht. Die Ergebnisse dieser Untersuchung werden im Rahmen dieser Arbeit verwendet.

Im Strömungslöser Fluent ist für die Wärmebilanz bei porösen Medien standardmäßig das Modell des thermischen Gleichgewichts eingestellt. Diesem Modell liegt, wie der Name schon andeutet, die Annahme zu Grunde, dass die Temperatur des Fluids identisch ist mit der Temperatur des Feststoffs. Dies entspricht der Annahme eines unendlich großen Wärmeübergangskoeffizienten. Es wird eine gemeinsame Gleichung für beide Medien gelöst. Der Akkumulationsterm setzt sich aus einem Teil für das Fluid und einem Teil für den Feststoff zusammen. Diese werden jeweils mit ihrem Volumenanteil gewichtet. Dieses Modell wird auch als Einzonnenmodell bezeichnet.

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} (\gamma \rho_f e_f + (1 - \gamma) \rho_s e_s)}_{\text{Akkumulation Gasphase und Feststoff}} + \nabla \cdot (\vec{v} (\rho_f E_f + p)) = \nabla \cdot \left( k_{\text{eff}} \nabla T - \left( \sum_i h_i J_i \right) + (\vec{\tau} \cdot \vec{v}) \right) + S_f^h \quad (4.30)$$

Die effektive thermische Leitfähigkeit  $k_{eff}$  wird ebenfalls durch eine Volumenmittelung im porösen Medium bestimmt.

$$k_{eff} = \gamma k_f + (1 - \gamma) k_s \quad (4.31)$$

Bei transienten Vorgängen kann die Gastemperatur stark von der Temperatur des porösen Körpers abweichen. In diesem Fall müssen die Temperaturen getrennt berechnet werden. Dies ist in Fluent über einen dualen Zellansatz möglich. Bei diesem Modell wird jeweils eine Bilanzgleichung für die Gasphase und die feste Phase gelöst. Somit wird für jede Phase eine Temperatur berechnet. Bei der Berechnung wird der Wärmeübergang zwischen diesen beiden Phasen berücksichtigt. Dieses Modell ist jedoch nur anwählbar, wenn keine Strahlung und keine Mehrphasenströmung berechnet wird [77]. Die Erhaltungsgleichungen werden durch die Gleichungen 4.32 und 4.33 repräsentiert. Die Erhaltungsgleichung des Fluids ist analog zu Gleichung 4.15 aufgebaut. Die Abweichungen sind, dass hier im Akkumulationsterm und Wärmeleitungsterm die Porosität mit einbezogen wird und dass es einen zusätzlichen Kopplungsterm gibt. Dieser Kopplungsterm setzt sich aus dem Wärmedurchgangskoeffizient  $h_{fs}$ , der Fläche der Phasengrenze und der Temperaturdifferenz zwischen der Gasphase und dem Feststoff zusammen.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\gamma \rho_f e_f) + \nabla (\vec{v} (\rho_f e_f + p)) = \nabla \left( \gamma k_f \nabla T_f - \left( \sum_i h_i J_i \right) + (\vec{\tau} \cdot \vec{v}) \right) \\ + S_f^h + \underbrace{k_{fs} A_{fs} (T_f - T_s)}_{\text{Kopplung}} \end{aligned} \quad (4.32)$$

Wie bei dem Term der Gasphase wird auch beim Feststoff die zeitliche Änderung und die Wärmeleitung mit dem Volumenanteil multipliziert. Bei dem Feststoff entfällt die Konvektion und der Kopplungsterm wird hier mit anderem Vorzeichen verwendet.

$$\frac{\partial}{\partial t} ((1 - \gamma) \rho_s e_s) = \nabla ((1 - \gamma) k_s \nabla T_s) + S_s^h + \underbrace{k_{fs} A_{fs} (T_s - T_f)}_{\text{Kopplung}} \quad (4.33)$$

Der Monolith ohne Katalysator hat nach [79] eine offene Frontfläche von 80 % und eine spezifische Oberfläche von  $34,4 \frac{cm^2}{cm^3}$ . Der hydraulische Durchmesser beträgt 0,93 mm. Die Porosität des Monolithen wurde in [25] zu 64 % angegeben. In dieser Arbeit werden beide Modelle hinsichtlich ihrer Eignung für die Simulation des Startvorgangs verwendet und bewertet.

#### 4.1.4.5 Mehrphasenströmungen

Bei den Mehrphasenmodellen wird zwischen Euler-Lagrange- und den Euler-Euler-Ansätzen unterschieden. Die gasförmige Phase wird in beiden Ansätzen als Kontinuum betrachtet für das die Navier-Stokes-Gleichungen gelöst werden. Die Modellierung der zweiten flüssigen Phase unterscheidet sich in beiden Modellen deutlich. Beim Euler-Euler Ansatz werden beide Phasen als sich gegenseitig durchdringende Kontinuen betrachtet. In die Erhaltungsgleichungen fließt bei diesen Modellen der Phasenvolumenanteil mit ein. In Fluent stehen drei verschiedene Euler-Euler-Modelle zur Verfügung. Diese sind das *mixture*-, das *eularian*- und das *volume of fluid*-Modell (VOF). Bei den Euler-Lagrange Modellen wird die feinverteilte zweite Phase durch die Verfolgung einer großen Anzahl an Partikeln gelöst. Eine Massen-, Momenten- und Energieübertragung zwischen den beiden Phasen ist möglich. Dieser Ansatz ist in Fluent in dem *discrete phase model* (DPM) realisiert. Dieses Modell eignet sich besonders für Eindüsen, bei denen der Volumenanteil der flüssigen Phase vernachlässigt werden kann. In diesem Modell werden keine Partikelwechselwirkungen berücksichtigt.

Im Rahmen einer Masterarbeit wurde ein Modell für die Simulation der Eindüsung basierend auf dem VOF-Modell erarbeitet [80]. Durch dieses Modell konnte der Einfluss einer Änderung der Düsengeometrie auf die Eindüsung gezeigt werden. Dieser Ansatz ist für die Optimierung der Düse sehr gut geeignet, da keine Modellparameter vorgegeben werden und basierend auf der Geometrie das Sprühbild der Düse berechnet wird. Der Nachteil dieses Modellansatzes ist, dass eine sehr feine Vernetzung im Bereich der Phasengrenzflächen benötigt wird. Aus diesem Grund führt dieser Ansatz zu hohen Rechenzeiten und stellt für die Modellierung ganzer Reaktoren oder Packages keine Option dar. Für die Simulation des Packages wird in dieser Arbeit das DPM-Modell für die Simulation der Eindüsen verwendet. Dieses wurde in [25] bereits für die Anwendung in einem Brenngaserzeugungssystem validiert. Dieses Modell zeichnet sich durch eine geringe Rechenzeit aus.

#### 4.1.5 Parallelisierung

Um die Rechenzeit zu reduzieren, ist es möglich die Rechnung auf mehrere Prozessoren aufzuteilen. Dieser Vorgang wird als Parallelisierung bezeichnet. Um parallelisierte Rechnungen durchführen zu können, muss das Netz auf die verschiedenen Prozessoren aufgeteilt werden. Dieser Vorgang wird als Partitionierung bezeichnet. Bei der Partitionierung gibt es drei primäre Ziele. Die Grundidee ist, dass jeder Prozessor gleich lange für die Berechnung brauchen soll. Eine Folgerung daraus ist, dass jeder Prozessor die gleiche Anzahl an Zellen berechnen soll. So soll die Last auf alle Prozessoren gleich verteilt werden und jeder Prozessor soll zur gleichen Zeit fertig sein. Weiterhin soll die Anzahl an Grenzflächen zwischen den Prozessoren möglichst gering gehalten werden, damit weniger Daten übers Netzwerk übertragen werden müssen. Das dritte Ziel ist, dass jeder Prozessor möglichst wenige Nachbarprozessoren besitzt, damit die Anzahl der Kommunikationswechsel zwischen den Prozessoren minimiert werden. Der Grundgedanke hier ist, dass es schneller ist auf einmal viele Daten zu übertragen, wie ganz oft wenige.

Bei der Verwendung von “user defined functions” (UDFs) muss ein besonderes Augenmerk auf die Parallelisierung geworfen werden. Bei einer sequentiellen Rechnung wird ein Cortex-Prozess gestartet, der die Benutzereingaben übersetzt und zusätzlich ein einzelner Fluent-Prozess, der die Gleichungen löst. Bei der parallelen Berechnung wird zusätzlich zum Cortex-Prozess ein Hostprozess gestartet. Dieser verwaltet die einzelnen Rechenprozessoren. Außerdem werden entsprechend der ausgewählten Anzahl an Prozessoren Berechnungsprozesse gestartet. Das Rechenggebiet wird dann auf die verschiedenen Partitionen aufgeteilt und jeder Prozessor berechnet die Werte innerhalb seiner Partition. Für die Kommunikation zwischen den Prozessoren wird der MPI-Standard (“Message Passing Interface”) verwendet. Standardmäßig kennt jeder Prozessor nur die Daten innerhalb seiner Partition. Sobald er auf Daten außerhalb seiner Partition zugreifen soll, müssen diese vorher übermittelt werden. Dafür gibt es in Fluent zwei vorgesehene Möglichkeiten. Bei der einen Variante werden die Werte gezielt von einem Prozessor an den Host-Prozess gesendet und können anschließend durch einen weiteren Befehl an einen beliebigen Prozessor gesendet. Diese Möglichkeit bietet vielfältige Möglichkeiten die Kommunikation zu steuern. Eine andere Möglichkeit besteht durch globale Reduktionsmakros. Mit diesen ist es möglich die Summen, das Minimum oder das Maximum der Ergebnisse aller Rechenknoten zu bestimmen und an alle Prozessoren zurückzugeben. Im Rahmen dieser Arbeit wird meistens der über die Grenzfläche gemittelte Wert benötigt. Aus diesem Grund werden die globalen Reduktionsmakros angewendet. Die Summe wird einmal auf die gewünschte Größe und einmal auf eine Zählvariable angewendet, um den gemittelten Wert bestimmen zu können.

## 4.2 Methodik der dynamischen Systemsimulation

Neben den strömungsdynamischen Simulationen werden auch dynamische Systemsimulationen mit dem Programm Matlab®\Simulink® durchgeführt. Das in dieser Arbeit verwendete Modell wurde durch eine Erweiterung eines bestehenden Modells [81] erstellt. Bei dem Modell handelt es sich um ein gekoppeltes elektrisches und chemisches Modell. Das Modell ist aus Blockschaltbildern aufgebaut. Diese werden beim Start der Simulation in Quellcode der Programmiersprache C übersetzt und anschliessend kompiliert. Einzelne Bauteile sind direkt durch S-Funktionen modelliert. In diesen wurde der Quellcode direkt in der Programmiersprache C geschrieben.

Der Aufbau des thermischen Modells ist in Abbildung 4.3 dargestellt. Das Brenngaserzeugungssystem setzt sich in diesem Modell aus den verschiedenen Komponenten zusammen. Zwischen diesen werden Vektoren mit den Stoffströmen der einzelnen Spezies und der Temperatur übergeben. Basierend auf den Temperaturen im System werden von der Steuerung Signale an die Mediendosierung und die Startkomponenten gegeben. Von der Mediendosierung werden Vektoren mit Stoffströmen an die Startkomponenten und das Brenngaserzeugungssystem übergeben. Die Temperatur der von der Mediendosierung zugeführten Stoffströme ist die Umgebungstemperatur. Die Brennstoffzelle ist in diesem thermischen Modell durch eine Energiegleichung repräsentiert.

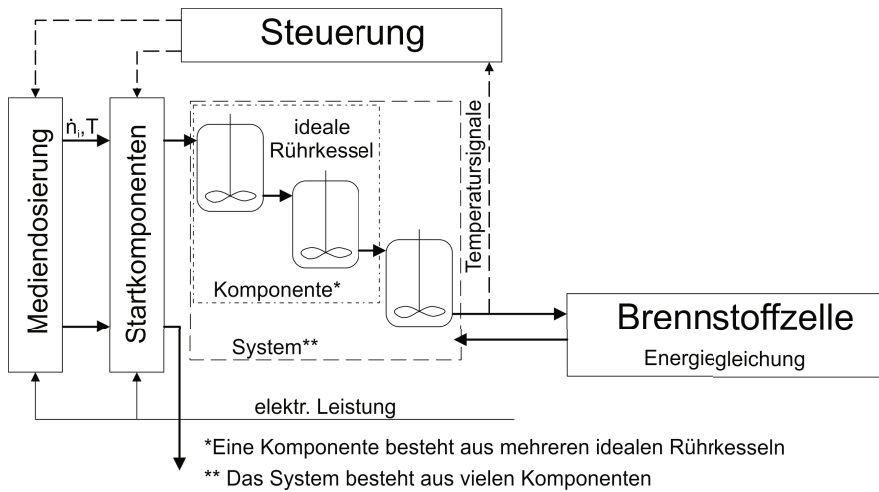


Abb. 4.3: Aufbau des dynamischen Systemmodells des Hybridsystems aus einer Batterie und der HT-PEFC-Brennstoffzelle mit Dieselreformierung

Die einzelnen Reaktoren des Brenngaserzeugungssystems werden durch eine Verschaltung von idealen Rührkesselreaktoren modelliert. Einem idealen Rührkessel liegt die Annahme zu Grunde, dass dieser ideal durchmischt ist. Das bedeutet, dass weder Konzentrations- noch Temperaturgradienten innerhalb des Reaktors vorliegen. Die aus dem Reaktor austretenden Stoffströme haben die gleiche Zusammensetzung und Temperatur wie die Stoffe im Rührkessel.

Die Stoffbilanz ergibt sich für den idealen Rührkessel zu Gleichung 4.34. Die Änderung eines Stoffes der Species  $i$  im Rührkessel ergibt sich aus der Differenz zwischen dem eintretenden und dem austretenden Stoffstrom und der Änderung durch chemische Reaktionen. Der austretende Stoffstrom lässt sich aus dem Volumenstrom und der Konzentration im Rührkessel berechnen. Die Randbedingung bei dieser Simulation ist, dass das Reaktorvolumen konstant bleibt. Die chemischen Reaktionen in den einzelnen Rührkesseln werden basierend auf den Bruttoreaktionsgleichungen berechnet. Die Reaktionsumsätze wurden entsprechend den Umsätzen aus experimentellen Daten angepasst.

$$\frac{dn_i}{dt} = \dot{n}_{i,0} - \dot{n}_i + V \sum_j \nu_{ij} r_j \quad (4.34)$$

Die Energiebilanz ist in zwei verschiedene Bilanzen aufgeteilt. So gibt es die Energiebilanz für die Gase im Rührkessel (4.35) und die Energiebilanz für die Reaktorhülle (4.36). Der linke Teil der Gleichungen beschreibt die Änderung der inneren Energie, die durch eine Änderung der Temperatur bedingt ist. Diese Wärmemenge wird auch als fühlbare Wärmemenge bezeichnet, da sie mit einem messbaren Temperaturanstieg verbunden ist. Diese setzt sich für den Fall des Fluids aus der Enthalpiedifferenz zwischen Ein- und Austritt, dem Wärmeübergang an die



Wand und der Änderung der inneren Energie aufgrund einer Stoffänderung zusammen. Diese Gleichung wurde aus der Änderung der Enthalpie hergeleitet. Die Änderung der Enthalpie mit der Zeit setzt sich aus der Summe der partiellen Ableitungen der Enthalpie nach der Temperatur und der Stoffmenge multipliziert mit den partiellen Ableitungen dieser Werte nach der Zeit zusammen. Der letzte Teil setzt sich aus der Enthalpieänderung durch Phasenübergänge und der Enthalpieänderung durch chemische Reaktionen zusammen. Die Energiebilanz für die Reaktorwand ergibt sich aus Gleichung 4.35 unter der Annahme, dass dort keine Stoffströme fließen und keine chemischen Reaktionen stattfinden.

$$nC_{p,m} \frac{dT_{\text{Gemisch}}}{dt} = \dot{H}_0 - \dot{H} + kA(T_{\text{Wand}} - T_{\text{Gemisch}}) - \sum_i \frac{\delta H}{\delta n_i} \frac{\delta n_i}{\delta t} \quad (4.35)$$

$$mC_p \frac{dT_{\text{Wand}}}{dt} = kA(T_{\text{Gemisch}} - T_{\text{Wand}}) \quad (4.36)$$

Die beiden Energiegleichungen sind durch den Wärmeübergangsterm miteinander verbunden. Die Temperaturen werden in dem erstellten Modell durch eine Integration der Temperaturänderungen berechnet. Die so errechnete Temperatur fließt direkt wieder in die Berechnung der Temperaturänderung ein. Dies geschieht zum Einen in der Enthalpieberechnung des austretenden Stoffstroms, zum Anderen in dem Wärmestrom des Fluids an die Wand. Bei der Berechnung der Energiebilanz fließt die Verdampfung und Kondensation von Wasser mit ein. So wird Wasser bei einer Enthalpie, die höher ist als die Enthalpie des Gemisches bei der Siedetemperatur, verdampft, bis die Differenz der beiden Enthalpien null wird.

Die Erweiterung des Modells zur Berechnung des gesamten Hybridsystems ist in Abbildung 4.4 dargestellt. Der Modellteil für die Simulation des Startvorgangs wurde um die Hybridkomponenten erweitert. Bei der Brennstoffzelle wird in diesem Modell neben der Energiegleichung der umgesetzte Wasserstoff und die sich daraus ergebenden Spannungen und Stromdichten errechnet. Durch den Aufbau eines elektrischen Ersatzschaltbildes kann die Brennstoffzelle dann flexibel mit der Batterie und dem Verbraucher gekoppelt werden. Von den elektrischen Komponenten gehen Steuersignale an die Steuerung des Hybridsystems. Diese Steuerung gibt dann eine Leistungsanforderung an die Steuerung des Brennstoffzellensystems.

Das durch das Brenngaserzeugungssystem produzierte Gasgemisch und die vorgewärmte Luft werden in diesem Modell zur Brennstoffzelle geleitet. In dieser findet ein Umsatz entsprechend des Wasserstoff-Nutzungsgrades statt. Der entstehende Strom wird durch das Faradaygesetz berechnet. Dieses stellt den Zusammenhang zwischen der transportierten Ladung und der umgesetzten Stoffmenge her. Dieser Zusammenhang ist in Gleichung 4.37 dargestellt.

$$Q = n \cdot z \cdot \underbrace{F}_{\text{Faradaykonstante}} = n \cdot z \cdot \underbrace{e}_{\text{Elementarladung}} \cdot \underbrace{N_A}_{\text{Avogadrokonstante}} \quad (4.37)$$

Durch die Verwendung des Stoffstroms, anstatt der umgesetzten Stoffmenge kann direkt der Strom ausgerechnet werden. Mit diesem Strom ist es durch die Strom-Spannungs-Kennlinie der Brennstoffzelle möglich die Spannung und die Leistung auszurechnen. Zur Berechnung der Spannung wird ein Ansatz nach [82] verwendet. Dieser ist in Gleichung 4.38 angegeben. Die

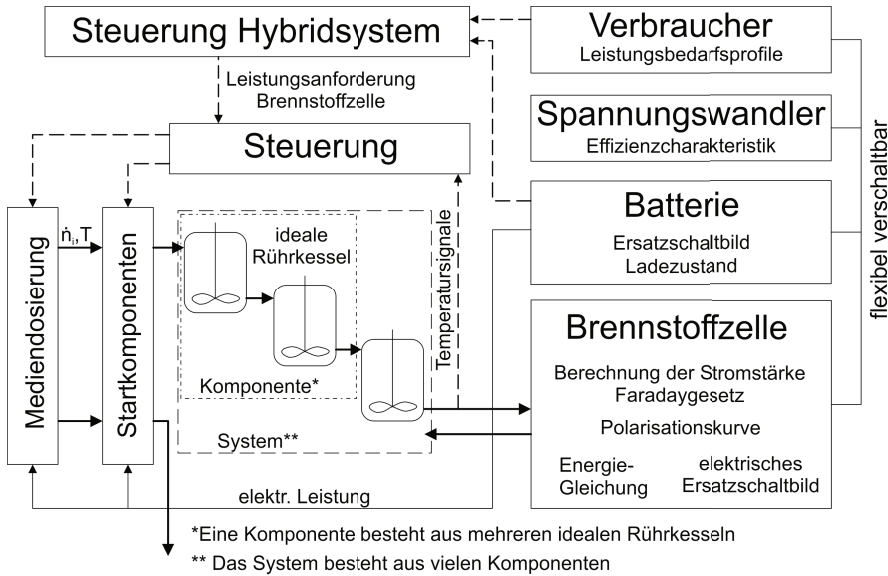


Abb. 4.4: Aufbau des dynamischen Systemmodells des Hybridsystems aus einer Batterie und der HT-PEFC-Brennstoffzelle mit Dieselreformierung

Spannung der Brennstoffzelle setzt sich aus der Nernstspannung abzüglich der Überspannungen zusammen. Die berücksichtigten Überspannungen sind die Aktivierungsüberspannung und Mischpotentialbildung, die Überspannung durch ohmsche Verluste und die Konzentrationsüberspannung. Die Konzentrationsüberspannung fällt in dem betrachteten Stromdichtenbereich der HT-PEFC nicht ins Gewicht und wird vernachlässigt.

$$E(i) = E_0 - \frac{RT}{zF} \ln\left(\frac{\frac{p_{H_2O}}{p_0}}{\frac{p_{H_2}}{p_0} \cdot \left(\frac{p_{O_2}}{p_0}\right)^{0.5}}}\right) - \frac{RT}{\alpha zF} \ln\left(\frac{i + i_{int}}{i_0}\right) - r_{Zelle} \cdot i + m \exp(ni) \quad (4.38)$$

In der Literatur gibt es verschiedene Ansätze zur Modellierung der Brennstoffzellenspannungskennlinie. Die offene Zellspannung wird in den folgenden Quellen einheitlich durch die Nernstspannung simuliert. Die Aktivierungsüberspannung wird in der Regel durch einen logarithmischen Ansatz modelliert. Für diesen Ansatz gibt es in der Literatur verschiedene Ausführungen. Von Chao und Jen [83] wurde ein Ansatz der Aktivierungsüberspannung entsprechend Gleichung 4.38 gewählt. In diesen geht neben der Stromdichte die Austauschstromdichte und der Wasserstoffcrossover mit ein. Ein anderer logarithmischer Ansatz wurde von Barelli et al. [84] gewählt. Von Ettahir et al. [46] wurde zur Berechnung der Aktivierungsüberspannung ein polynomischer Ansatz vorgestellt. In diesen gehen die Temperatur, der Sauerstoffpartialdruck und die Stromdichte ein. Sowohl bei dem Sauerstoffpartialdruck als auch der Stromdichte geht der Logarithmus dieser Größen ein. Die ohmschen Verluste werden in der Literatur einheitlich durch

einen Widerstand simuliert. Für die Konzentrationsüberspannung ist ein exponentieller Ansatz am weitesten verbreitet. Dieser wird beispielsweise von Al-Dabbagh et al. [85] verwendet. Es gibt jedoch auch Ansätze wie den von Ettahir et al. [46] bei dem ein logarithmischer Ansatz verwendet wird. In Abbildung 4.5 ist die Strom-Spannungskennlinie einer HT-PEFC mit Reformatbetrieb gezeigt. Die einzelnen Punkte wurden im stationären Zustand aufgenommen. Die experimentellen Messwerte, die durch die roten Quadrate dargestellt sind, wurden zur Anpassung der empirischen Polarisationskurve verwendet. Die Parameter der Gleichung 4.38 wurden so angepasst, dass die Abweichung zwischen den Experimenten und der Simulation minimal wurde. Aus dieser Anpassung ergibt sich eine Austauschstromdichte von  $1,18 \cdot 10^{-5} \frac{A}{cm^2}$ , ein  $\alpha$  von 0,346 und ein interner Widerstand von  $0,4 \text{ } \Omega \cdot cm^2$ . Erkennbar ist die starke Abweichung zwischen den Spannungen im Bereich der offenen Zellspannung. Für eine Stromdichte von  $0 \frac{A}{cm^2}$  liegt die simulierte Spannung um 30 % neben den experimentellen Messdaten. Diese Abweichung sinkt jedoch mit zunehmender Stromdichte sehr schnell ab. Auf die berechnete Leistung wirkt sich diese Abweichung kaum aus, da diese bei einem Strom von 0 A 0 W beträgt und dann erst mit zunehmender Stromstärke ansteigt. Mit den ermittelten Werten liegt die maximale Abweichung der Leistung bei 2 % bezogen auf den experimentellen Wert. Dies gilt ebenfalls für die Abweichung der Spannung mit der Ausnahme des Falls der offenen Zellspannung, indem kein Strom fließt.

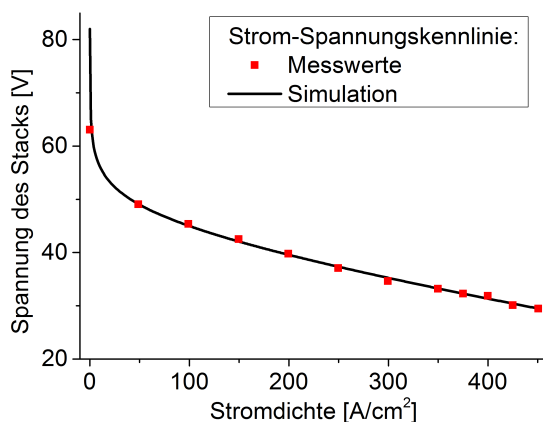


Abb. 4.5: Vergleich zwischen experimentell ermittelter und simulierter Polarisationskurve der HT-PEFC

Der elektrische Teil des Modells besteht aus der Brennstoffzelle, einem Verbraucher, der Batterie und je nach Verschaltung keinem Spannungswandler bis mehreren Spannungswandlern. Die Modelloberfläche ist aus nicht kausalen Blöcken aufgebaut. Die Maschen- und Knotenregel wird bei der Verwendung dieser Blöcke automatisch gelöst. Dies macht das Modell hinsicht-

lich der Verschaltung sehr flexibel. Bei der Darstellung des Modells in Abbildung 4.4 sind die elektrischen Verbindungen und die Stoffmengenströme dargestellt. Die von den einzelnen Komponenten ausgehenden Steuersignale sind hier nicht gezeigt. Die benötigte Leistung des Verbrauchers wird durch ein Leistungsbedarfsprofil der zu untersuchenden Anwendung vorgegeben. Der Leistungsbedarf des Verbrauchers wird als Stromsenke modelliert. Die Stromstärke berechnet sich aus der benötigten Leistung und der Spannung des Gleichstrombuses. Die Spannung des DC-Buses stellt sich durch ein Leistungsgleichgewicht ein. Die produzierte Leistung muss der benötigten Leistung entsprechen. Bei steigender benötigter Leistung sinkt die Spannung des Energiewandlers und der Strom steigt. Der Spannungswandler wird durch eine gemessene Funktion des Wirkungsgrades in Abhängigkeit der Leistung modelliert. Der modulare Aufbau des Systems ermöglicht die Überprüfung der verschiedenen Hybridkonzepte wie sie in Abschnitt 3.2 vorgestellt wurden. Durch die dynamische Berechnung ist es möglich verschiedene Betriebszustände zu untersuchen.

Die Batterie wird in diesem Modell unter Verwendung der Simscape-Bibliothek modelliert. Diese Bibliothek ermöglicht die nicht-kausale Verschaltung der einzelnen Komponenten. In der Literatur existieren verschiedene Modelle für die Simulation von Batterien. Häufig werden wie von Barelli et al. [84] die grundlegenden Zusammenhänge zwischen Leistung, Spannung, Widerstand und Stromstärke genutzt und aus diesen ein Zusammenhang für eine dieser Größen entwickelt. Die Batteriespannung ergibt sich für ein Modell aus einer Spannungsquelle und einem Widerstand aus der offenen Zellspannung abzüglich der ohmschen Verluste. Die Batterieleistung ergibt sich aus dem Produkt der Spannung und der Stromstärke. Durch Einsetzen und Umformen dieser Gleichungen lässt sich die Gleichung für die Stromstärke entsprechend Gleichung 4.39 herleiten.

$$I_{bat} = \frac{V_{ocv}(SOC) - \sqrt{V_{ocv}^2(SOC) - 4R_{bat}^{int}(SOC)P}}{2R_{bat}^{int}(SOC)} \quad (4.39)$$

Dieser Ansatz der Modellierung mit einer Spannungsquelle und einem Widerstand ist weit verbreitet. Dieser Ansatz wird von [84], [86] und [87] verwendet. In der Veröffentlichung von Lopes et al. [87] wurde dieser Ansatz zusammen mit einem Peukert-Modell für Bleibatterien verwendet. Einhorn et al. [88, 89] haben einen Vergleich zwischen verschiedenen Modellen für einen Fahrzyklus durchgeführt. Bei diesem Vergleich wurde der integrierte quadratische Fehler nach der Durchführung des Fahrzykluses verglichen. Es wurden Modelle bestehend aus einem Widerstand, einem Widerstand und einem Widerstand-Kondensator-Parallelglied (RC-Glied) sowie einem Widerstand und zwei RC-Gliedern miteinander verglichen. Das Modell mit einem RC-Glied führte zu einer deutlich höheren Genauigkeit als das Modell, das nur aus der Spannungsquelle und dem Widerstand bestand. Der integrierte quadratische Fehler in der Spannung reduzierte sich durch das RC-Glied von 23 mV auf 10 mV für eine 3,6 V Batterie. Ein zusätzliches RC-Glied erhöhte die Genauigkeit nur noch geringfügig auf einen quadratischen Fehler von 9 mV. Es wird angegeben, dass die Parametrisierung für das Modell mit nur einem RC-Glied einfacher ist, wie für das Modell mit zwei RC-Gliedern. Von Garcia et al. [45] wurde ein Modell vorgestellt, welches durch 3 Punkte der Entladekurve parametrisiert werden kann. In dieser Arbeit wurde der Ansatz einer Reihenschaltung aus einer Spannungsquelle, einem

Widerstand und einem parallelen Widerstand-Kondensatorglied gewählt. Dieses Batteriemodell wurde im Rahmen der Zusammenarbeit mit dem Institut für Kraftfahrzeuge der RWTH Aachen und dem IEK-3 im Projekt "Elektrochemische Speicher im System - Sicherheit und Integration" vom Institut für Kraftfahrzeuge entwickelt und die dazugehörigen Kennwerte wurden vermessen. Eine ladezustandsabhängige Spannungsquelle repräsentiert die offene Zellspannung der Batterie. Die Summe der beiden Widerstände bestimmt die ohmschen Verluste und die Parallelschaltung zwischen Kondensator und Batterie sorgt für das Übergangsverhalten bei einem Leistungswechsel. Die Differentialgleichung für das RC-Glied wird durch eine Laplace-Transformation gelöst. Die offene Zellspannung und die Widerstände sind bei diesem Modell von dem Ladezustand der Batterie abhängig. Dieser wurde bereits in Kapitel 2.4.1 erklärt. Für die Berechnung des Ladezustands gibt es in der Literatur wiederum verschiedene Konzepte. Die allgemeinen Gleichungen für die Berechnung des SOC sind die integrale und die differentielle Form in den Gleichungen 4.40 und 4.41. Bei diesen Gleichungen ist es wichtig, dass die Stromrichtung festgelegt ist, weil damit das Vorzeichen bestimmt wird. Hier bedeutet ein positiver Strom, dass die Batterie entladen wird.

$$SOC(t) = SOC(t_0) - \frac{\int I_{Bat} \cdot \eta dt}{UF \cdot Q} \quad (4.40)$$

$$\frac{d}{dt}[SOC(t)] = \frac{-I_{bat} \cdot \eta}{UF \cdot Q} \quad (4.41)$$

Von Zhang et al. [48] und Wilhelm [90, S.105] wird die integrale Form des Ladezustands verwendet. Bei beiden Modellen wird der Umrechnungsfaktor UF und der Wirkungsgrad  $\eta$  zu eins gesetzt. Von Wilhelm [90, S.105] wird eine weitere Berechnungsmethode angegeben, bei der der Peukert-Effekt für Bleibatterien mitberücksichtigt wird. Von Ettahir et al. [46] wird der Umrechnungsfaktor zu 3600 angegeben. Dies ist auf die Angabe der Kapazität in Ah anstatt As zurückzuführen. Sundstrom und Stefanopoulou [86] verwenden bei der Berechnung einen Ladewirkungsgrad von 0,9 und einen Entladewirkungsgrad von 1, wohingegen bei Barelli et al. [84] der Wirkungsgrad für den Ladevorgang aus dem Quotienten aus der offenen Zellspannung und der Spannung der Batterie berechnet wird. Beim Entladevorgang wird von Barelli et al. [84] der Wirkungsgrad aus der Inversen des Ladewirkungsgrades berechnet. In dem Simulationsmodell in dieser Arbeit wird der Ladezustand analog zu Zahng et al. [48] und Wilhelm [90] durch die Gleichung 4.40 mit einem Umrechnungsfaktor und einem Wirkungsgrad von 1 berechnet.

Die hier dargestellte Methodik zur strömungsdynamischen Simulation und der dynamischen Systemsimulation werden in dieser Arbeit eingesetzt, um das Brennstoffzellensystem mit einem integrierten Ansatz weiterzuentwickeln. Dabei werden die Punkte Startvorgang, Hybridisierung und Packaging näher betrachtet. Bei dieser Methodik ist es entscheidend, das richtige Werkzeug für den jeweiligen Einsatz zu wählen. Konzepte müssen zuerst thermodynamisch und dann durch das dynamische Systemmodell überprüft werden. Das Systemmodell zeichnet sich durch eine kurze Simulationsdauer aus. Für eine detaillierte Auslegung der einzelnen Komponenten muss jedoch die strömungsdynamische Simulation verwendet werden. Dieses

Simulationswerkzeug wird jedoch erst angewandt, wenn klar ist, dass das Konzept prinzipiell funktionieren kann.



## 5 Entwicklung einer Anfahrstrategie

In diesem Kapitel soll eine Anfahrstrategie für das Brennstoffzellensystem entwickelt werden. Im ersten Teil des Kapitels werden verschiedene Aufheizkonzepte für den Startvorgang des Brennstoffzellensystems entwickelt. In diese Konzepte fließen die Erkenntnisse aus dem Stand der Technik in Abschnitt 3.3 mit ein. Diese Konzepte werden anschließend hinsichtlich ihrer Machbarkeit bewertet und in dynamischen Systemsimulationen überprüft. Dazu wird das in Kapitel 4.2 beschriebene Systemmodell verwendet. Dieses wird im Programm Matlab®\Simulink® umgesetzt. Die Ergebnisse der dynamischen Simulationen geben Aufschluss über die verschiedenen Konzepte und sind der Ausgangspunkt für die Hybridberechnungen im nächsten Kapitel. Im zweiten Teil des Kapitels werden strömungsdynamische Simulationen des Brenngaserzeugungssystems durchgeführt. Für diesen Zweck wird ein zweidimensionales transientes Modell des Brenngaserzeugungssystems erarbeitet. Mit diesem Modell wird es möglich, orts aufgelöste Erkenntnisse über den Startvorgang zu erlangen. Das Modell wird durch den Vergleich mit experimentellen Daten überprüft. Mit diesem Modell werden anschließend mehrere verschiedene Aufheizstrategien untersucht. Beide Modelle sollen einen unterschiedlichen Detaillierungsgrad hinsichtlich der Erkenntnisse liefern.

### 5.1 Entwicklung eines Anfahrkonzeptes für das Brennstoffzellensystem

In diesem Abschnitt soll ein Startkonzept für das Brennstoffzellensystem entwickelt werden. Bei der Entwicklung des Anfahrkonzeptes gibt es mehrere Randbedingungen zu beachten. Der Aufbau des Systems im stationären Zustand soll möglichst wenig verändert werden. Es soll ein kompaktes System mit einem geringen Druckverlust des Systems im stationären Zustand sein. Für den Startvorgang sollen wenige zusätzliche Komponenten verwendet werden. Aufgrund der möglichen Rußbildung soll das Abgas des Startbrenners nicht durch das Brenngaserzeugungssystem geleitet werden. Weiterhin müssen die Temperaturgrenzen der einzelnen Komponenten eingehalten werden. Die maximalen Eintrittstemperaturen liegen für den Dampf- und Lufteintritt des Reformers bei 600 °C. Weiterhin sollte der Startvorgang mit dem für den stationären Fall ausgewählten Verdichter realisiert werden können. Das Anfahrkonzept soll alle diese Randbedingungen vereinen und zu einer kurzen Aufheizdauer mit einem geringen Energieverbrauch führen. Hierzu wurden zwei Aufheizkonzepte entwickelt, die im Folgenden aufgeführt sind. Bei diesen Konzepten handelt es sich um einen thermischen und einen elektrischen Startvorgang.



### 5.1.1 Thermischer Startvorgang des Systems

Beim thermischen Startvorgang wird ein Startbrenner zur Aufheizung des Systems verwendet. Das Abgas des Startbrenners wärmt Luft in einem Wärmeübertrager auf. Diese Luft wird anschließend verwendet, um das System aufzuheizen. Der Systemaufbau des thermischen Konzepts ist in Abbildung 5.1 dargestellt. Für den stationären Betrieb treten durch diesen Systemaufbau keine Änderungen auf. Während der Startphase wird in dem Startbrenner Diesel verbrannt. Als Startbrenner wird der von Wiethege [26] ausgewählte Startbrenner der Firma Physitron verwendet.

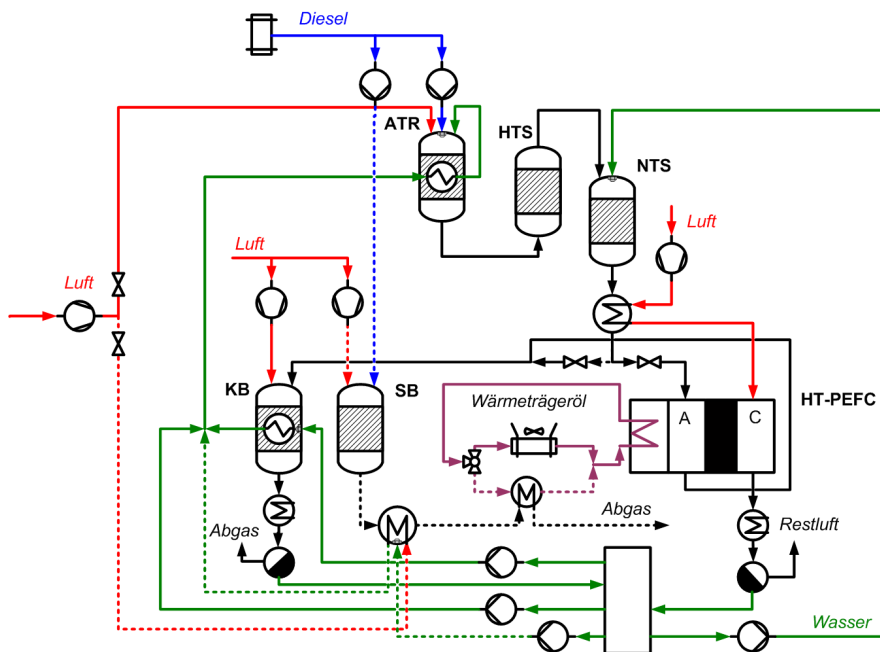


Abb. 5.1: Systemschaltungskonzept für eine Aufheizung mittels Startbrenner

Das Abgas des Dieselmotors wird durch einen ersten Wärmeübertrager geleitet. In diesem wird zuerst Luft erwärmt und anschließend zusätzlich Wasser verdampft und überhitzt. Das Abgas des Startbrenners strömt anschließend durch einen zweiten Wärmeübertrager, indem Wärmeträgeröl aufgewärmt wird, welches zur Vorheizung der Brennstoffzelle benutzt wird. Die erwärmte Luft wird in den Wärmeübertrager des Reformers geleitet und heizt seriell den Reformer, die Wassergasshift-Stufen, den Reformat-/Luft-Wärmeübertrager und den katalytischen Brenner auf. Sobald in allen durchströmten Komponenten der Taupunkt überschritten ist, kann mit der Zugabe von Wasser begonnen werden. Das Wasser soll ebenfalls in dem selben Wärmeübertrager erhitzt, vollständig verdampft und überhitzt werden. Der Startbrenner wird bei diesem Konzept so lange betrieben, bis der Reformer gezündet wurde, der Katalytbren-

ner ausreichend Wasserdampf bereitstellt und die Brennstoffzelle eine Temperatur von 140 °C überschritten hat. Bis dahin wird die Brennstoffzelle im Bypass betrieben. Das Reformat strömt im Bypass-Modus vom Reformat-/Luft-Wärmeübertrager direkt zum Katalytbrenner und wird dort katalytisch umgewandelt. Nachdem die Brenngaserzeugung und die Brennstoffzelle aufgewärmt sind, wird das Reformat auf die Anode geleitet und die Brennstoffzelle beginnt mit der Stromproduktion.

Der Startbrenner wurde bisher nicht im Systembetrieb getestet. Aus diesem Grund wurden ausführliche Versuche mit dem Startbrenner durchgeführt. Ein Versuchsergebnis mit einer am Startbrenner eingestellten Leistung von 6 kW ist in Abbildung 5.2 dargestellt. Während des Betriebs des Startbrenners wurde in diesem Versuch die elektrische Leistungsaufnahme des Startbrenner-Moduls und der Temperaturverlauf des Abgases gemessen.

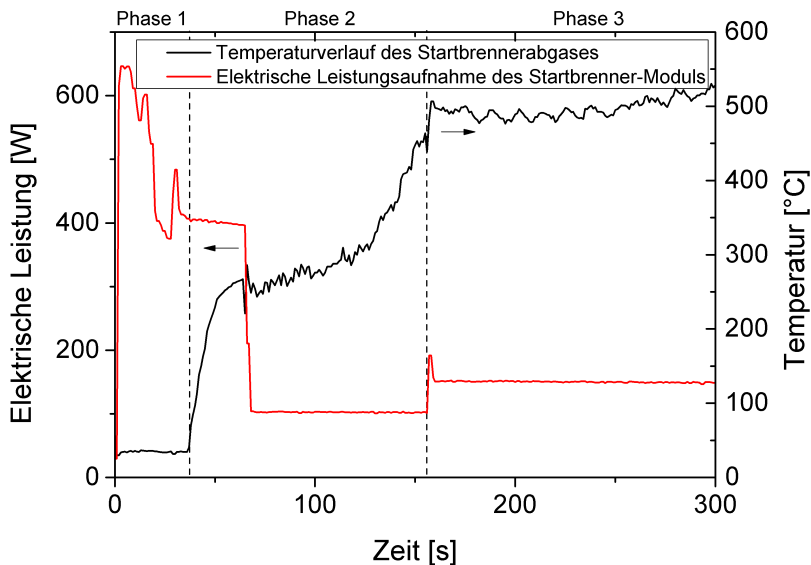


Abb. 5.2: Experimentelle Untersuchung des Startvorgangs des Startbrenners

Der Betrieb des Startbrenners lässt sich in drei Phasen einteilen. Diese Phasen wurden in der Steuerung des Startbrenners herstellereitig hinterlegt. In der ersten Phase wird der Startbrenner mit einer maximalen Leistung von 650 W intern elektrisch beheizt. In dieser ersten Phase werden dem Startbrenner noch keine Medien zugeführt. An diese Phase schließt sich die zweite Phase an, in der der Startbrenner mit einer geringen Leistung gezündet wird. Nachdem der Startbrenner vorgewärmt ist, wird die zugegebene Luftmenge und die Kraftstoffmenge erhöht. Damit startet die dritte Phase des Startbrennerbetriebs. Die Luftmenge ist in diesem Fall die maximale Luftmenge bei dem gegebenen Gegendruck des Gebläses. Die Kraftstoffmenge

kann über eine Vorgabe der Leistung eingestellt werden. Bei der konstanten Luftmenge wird durch die Änderung der Leistung direkt die Temperatur des Brennerabgases beeinflusst. Der Zusammenhang der adiabaten Verbrennungstemperatur mit der Leistung ist in Abbildung 5.3 gezeigt.

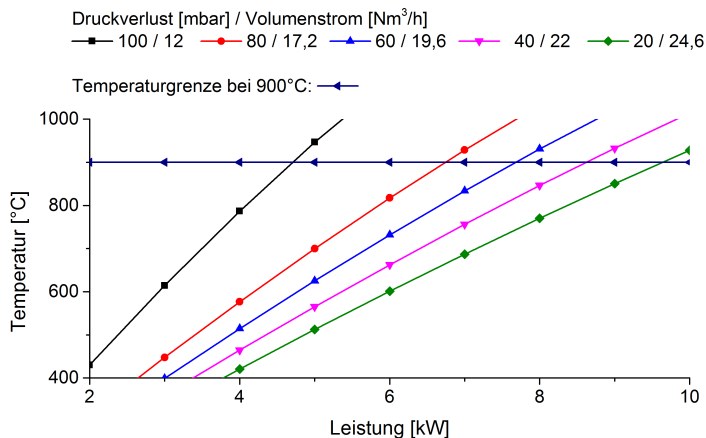


Abb. 5.3: Adiabate Verbrennungstemperatur in Abhängigkeit der Leistung und des Luftvolumenstroms

Durch den steigenden Gegendruck im Systembetrieb sinkt die Luftmenge des Startbrennergebläses weiter ab. Der Volumenstrom sinkt von  $24,6 \text{ Nm}^3/\text{h}$  bei einem Gegendruck von 20 mbar auf  $17,2 \text{ Nm}^3/\text{h}$  bei einem Gegendruck von 80 mbar ab. Diese Werte basieren auf der Verdichterkennlinie des Herstellers. Der Wärmeübertrager soll auf eine maximale Temperatur von  $900 \text{ }^{\circ}\text{C}$  ausgelegt werden. Diese Auslegung basiert auf dem Werkstoff 1.4876. Bei einer höheren Temperatur müsste die Materialstärke des Wärmeübertragers erhöht werden. Dies würde zur Erhöhung der thermischen Masse führen, was der schnelleren Aufheizung durch die höhere Temperatur entgegen wirkt. Durch den Abfall der Luftmenge sinkt die Luftzahl des Startbrenners mit zunehmendem Gegendruck, wodurch die Abgastemperatur deutlich ansteigt. Die maximale Leistung sinkt dadurch von  $9,6 \text{ kW}$  bei 20 mbar auf  $6,7 \text{ kW}$  bei 80 mbar Gegendruck ab. Weiterhin verlaufen die Temperaturkurven bei einem geringeren Luftvolumenstrom steiler. Ein zusätzlicher Anstieg des Gegendrucks von 80 mbar auf 100 mbar würde unter Einhaltung der Temperaturgrenze von  $900 \text{ }^{\circ}\text{C}$  zu einer Leistungsreduzierung auf  $4,6 \text{ kW}$  führen. Für die erste Phase des Aufheizvorgangs zeigt sich, dass die maximale Leistung aufgrund der Austrittstemperatur des Abgases aus dem Wärmeübertrager limitiert werden muss. In diesem Wärmeübertrager ist eine Austrittstemperatur von maximal  $400 \text{ }^{\circ}\text{C}$  angestrebt, sodass im nachfolgenden Wärmeübertrager günstigere Werkstoffe verwendet werden können. Eine Analyse der benötigten Energie ergab hier eine maximale Leistung von  $5 \text{ kW}$ . Eine Reduzierung der Leistung auf  $5 \text{ kW}$  ergibt sich die Eintrittstemperatur des Wärmeübertragers

zu 700 °C. Der Normvolumenstrom des Abgases ändert sich durch die Erhöhung der Leistung kaum. Der Gegendruck des Startbrennergebläses spielt eine wichtige Rolle für den Betrieb während des Startvorgangs. Dieser Zusammenhang soll in Kapitel 7 wieder aufgegriffen werden, wenn der im Package benötigte Wärmeübertrager hinsichtlich des Druckverlustes optimiert wird. Die Steuerung des Startbrenners sieht eine Zweipunktregelung der Temperatur vor. Es kann in der Steuerung eine maximale und eine minimale Leistung eingestellt werden. Durch die Leistungsänderung wird die Temperatur des Abgases beeinflusst. Während der Aufheizphase müssen verschiedene Temperaturgrenzen eingehalten werden. Aus diesem Grund muss die Leistung des Startbrenners während der Aufheiz- und der Startphase angepasst werden. Der Startbrenner soll innerhalb einer Phase mit einer konstanten Temperatur betrieben werden.

Der Aufheizvorgang des Brennstoffzellensystems mit dem thermischen Startkonzept wurde mit dem in Abschnitt 4.2 vorgestellten Modell simuliert. Das Simulink-Modell wurde im Rahmen einer Masterarbeit [91] an das bestehende Brenngaserzeugungssystem angepasst. Die simulierten Temperaturverläufe wurden durch Anpassung der Wärmeübergangskoeffizienten an die experimentellen Daten angepasst. Weiterhin wurde die Steuerung basierend auf den Temperaturwerten implementiert. Die für die Aufheizung der Brennstoffzelle benötigte Leistung ist für eine gegebene Startzeit proportional mit der thermischen Masse der Brennstoffzelle verknüpft. Da die HT-PEFC sich momentan noch in einem frühen Entwicklungsstadium befindet, ist eine Gewichtsprognose für einen kommerziellen Stack schwer durchführbar. Die Brennstoffzelle besteht bei dem aktuellen System aus 2 Jülich IV Stacks mit jeweils 3 Modulen und liefert eine elektrische Leistung von 5 kW. In der aktuellen Version kommt die Brennstoffzelle auf ein Gesamtgewicht von 266 kg. Bei den hier durchgeführten Berechnungen wurde von 20 % des Gewichts des aktuellen Jülich IV Stacks ausgegangen. Eine Gewichtsreduktion in dieser Größenordnung ist durch den Ersatz der graphitischen durch metallische Bipolarplatten mit integrierten Kühlkanälen erreichbar. Die Randbedingungen zu den Simulationen der Brennstoffzelle und des Brenngaserzeugungssystems befinden sich im Anhang. Der modulare Aufbau des Systems ermöglicht eine schnelle Änderung der Verschaltung, wodurch die verschiedenen Konzepte untersucht werden können. Die mit dem Modell durchgeführten Simulationen geben Aufschluss über die benötigte Startzeit und die benötigte Energie. Die favorisierten Aufheizkonzepte fließen dann im nächsten Kapitel in die Berechnung und Auslegung des Hybridsystems mit ein.

Mit diesem Modell wurden verschiedene Fälle für den Aufheizvorgang berücksichtigt. Die Aufheizvorgänge mit dem thermischen Konzept unterscheiden sich hinsichtlich der zuerst aufgewärmten Komponenten. In Abbildung 5.4 ist ein Startvorgang gezeigt, bei dem zuerst das Brenngaserzeugungssystem aufgeheizt wird. In diesem Diagramm sind zum einen die Temperaturen des Startbrenners und der in den Wärmeübertragern erwärmten Luft und des Wärmeträgeröls dargestellt. Zum Anderen sind die Temperaturen der Brenngaserzeugungskomponenten und der Brennstoffzelle gezeigt. In diesem Fall wurde der Startbrenner unter Annahme eines Gegendrucks von 80 mbar betrieben. In dem simulierten Fall wird dem Startbrenner-Wärmeübertrager direkt Luft zugegeben, die anschließend durch dem Reformier zugeführt wird. Der Startbrenner wird zuerst mit einer Leistung von 5 kW betrieben. Durch das heiße Abgas

wird Luft aufgeheizt, die mit bis zu 600 °C in den Reformer geleitet wird. Durch die Luft werden die Komponenten sequentiell aufgeheizt und der Reformer ist nach ungefähr 11 Minuten zündbereit. Kurz bevor der Reformer gezündet wird, wird Wasser im Wärmeübertrager verdampft und dem Reformer zugegeben. Durch die höhere benötigte Enthalpie zur Wasserverdampfung sinkt die Temperatur kurzzeitig leicht ab, bis der Reformer zündet. Der hier dargestellte Fall basiert auf einem Start und Betrieb des Reformers mit 20 % seiner maximalen Leistung. Die Luftzufuhr in den Wärmeübertrager wird nachdem der Reformer gezündet ist abgestellt und der Startbrenner mit einer niedrigeren Leistung betrieben. Durch die niedrigere Leistung sinkt die Temperatur deutlich ab. Bei einer Leistung des Startbrenners von 3 kW sinkt die Abgastemperatur auf etwa 600 °C ab. Dadurch dass keine Luft mehr durch den Wärmeübertrager strömt, wird diese Temperatur auch am Austritt des Wärmeübertragers erreicht. Somit werden die anvisierten 400 °C am Eintritt des zweiten Wärmeübertragers nur während des Aufheizvorgangs des Brenngaserzeugungssystem eingehalten. Während der weiteren Aufheizung der Brennstoffzelle werden diese überschritten. Dieser Vorgang ist nur geeignet, um das Brenngaserzeugungssystem zu starten. Für einen Start des gesamten Systems müsste der Wärmeübertrager für die Aufheizung der Brennstoffzelle auf höhere Temperaturen ausgelegt werden.

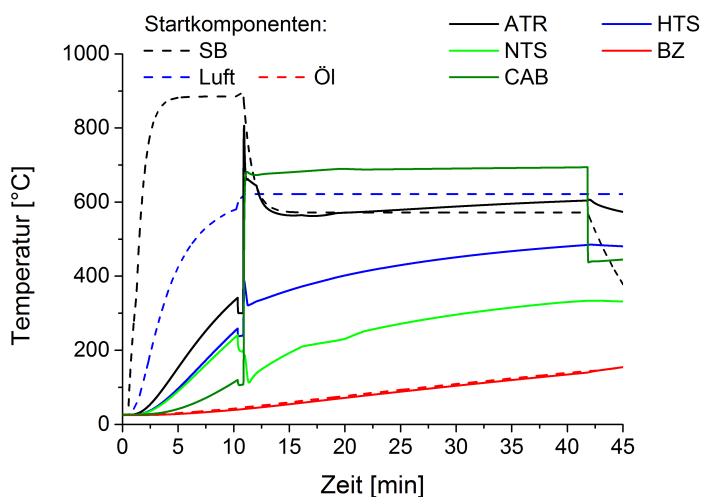


Abb. 5.4: Aufheizkurven bei dem thermischen Startvorgang - Brenngaserzeugungssystem wird zuerst aufgewärmt

In Abbildung 5.5 ist ein weiterer thermischer Startvorgang gezeigt, bei dem zuerst die Brennstoffzelle aufgeheizt wird. Die Leistung des Startbrenners ist mit 3 kW zu Beginn so gewählt, dass eine Abgastemperatur des Brenners von 600 °C erreicht wird. Die Temperatur der Luft im Wärmeübertrager erreicht nach ungefähr 15 Minuten die 600 °C. Dies ist darauf zurückzuführen, dass zuerst die Brennstoffzelle aufgeheizt werden soll und keine Luft durch den

Wärmeübertrager hinter dem Startbrenner strömt. Die Brennstoffzelle wird durch das Öl aufgewärmt. In dem zweiten Wärmeübertrager wird zu diesem Zweck Wärme vom Abgas an das Öl übertragen. Nachdem die Brennstoffzelle eine Temperatur von 120 °C erreicht hat, wird die Luftzufuhr zum Brenngaserzeugungssystem gestartet. Der Startvorgang des Brenngaserzeugungssystems wird durch den vorgewärmten Wärmeübertrager mit ungefähr 8 Minuten deutlich schneller realisiert. Der gesamte Startvorgang dauert jedoch mit 43 Minuten wesentlich länger, als der Startvorgang bei dem das Brenngaserzeugungssystem zuerst aufgewärmt wird.

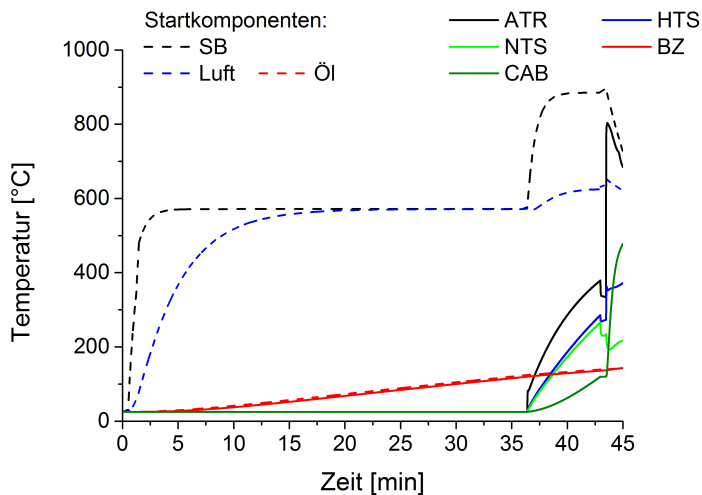


Abb. 5.5: Aufheizkurven bei dem thermischen Startvorgang - Brennstoffzelle wird zuerst aufgewärmt

Der thermische Startvorgang, bei dem das Brenngaserzeugungssystem zuerst gestartet wird, führt zu einer Aufheizzeit von 11 Minuten für die Brenngaserzeugung und 42 Minuten für die Brennstoffzelle. Der thermische Energiebedarf bis die Brennstoffzelle aufgeheizt ist, ist mit 6,3 kWh jedoch sehr hoch. Dies ist auf den Betrieb des Reformers während der Aufheizphase der Brennstoffzelle zurückzuführen. Ein weiteres Aufheizen ohne die Zündung des Reformers könnte im Bereich der Kraftstoff und Wassereindüsen zur Verdampfung in den Düsen führen und wird deshalb ausgeschlossen. Dieser Startvorgang wird nur gewählt, wenn ausschließlich das Brenngaserzeugungspackage aufgeheizt werden soll.

Bei dem Startvorgang, in dem die Brennstoffzelle zuerst vorgewärmt wird, wird eine Aufheizzeit von 8 Minuten für das Brenngaserzeugungssystem und 44 Minuten für die Brennstoffzelle benötigt. Das Brenngaserzeugungssystem wurde in der Simulation so gestartet, sodass nach 43 Minuten eine Zündung möglich war. Die benötigte thermische Energiemenge beträgt für

diesen Startvorgang 2,6 kWh. Die lange Aufheizzeit ist durch die Temperaturgrenzen der einzelnen Komponenten bedingt. Die Leistung des Startbrenners muss zur Einhaltung dieser Grenzen limitiert werden. Dieses Hindernis ließe sich mit einem anderen Startbrennergebläse umgehen. Die Temperaturgrenzen ließen sich mit einem höheren Luftvolumenstrom auch mit einer höheren zugegebenen Leistung einhalten.

### 5.1.2 Elektrischer Startvorgang des Systems

Bei dem elektrischen Startvorgang wird das Brenngaserzeugungssystem durch elektrische Heizungen aufgewärmt. Die Brennstoffzelle soll anschließend durch die Abwärme des Brenngaserzeugungssystems aufgewärmt werden. Eine elektrische Aufheizung der Brennstoffzelle ist aufgrund der hohen thermischen Masse momentan nicht sinnvoll. Das Systemlayout des elektrischen Konzepts ist in Abbildung 5.6 dargestellt. Bei diesem Konzept wird der Startvorgang des Brenngaserzeugungssystems ausschließlich elektrisch durchgeführt. Zu diesem Zweck wird in einem ersten Schritt Luft erhitzt und durch die Komponenten des Brenngaserzeugungssystems geleitet.

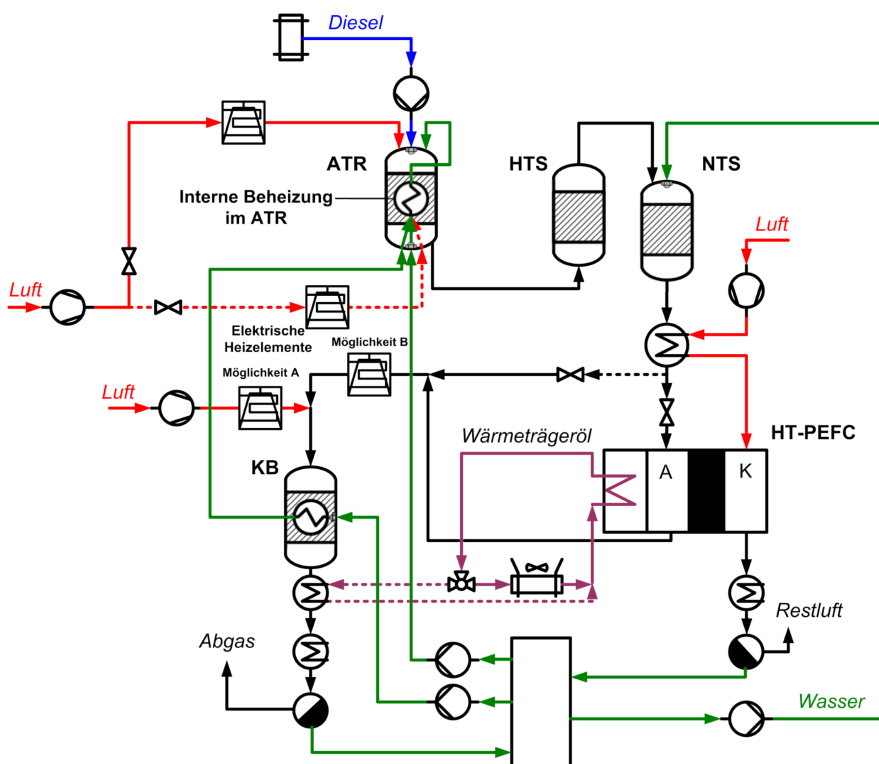


Abb. 5.6: Fließbild des Systems mit elektrischer Aufheizung

Die heiße Luft kann durch beide Zuleitungen des Reformers geleitet werden. Bei dem elektrischen Konzept besteht eine höhere Flexibilität, sodass hier an verschiedenen Stellen aufgeheizt werden kann. Die verschiedenen Möglichkeiten werden in den folgenden zeitaufgelösten Simulationen näher untersucht. Bei diesem Konzept kann auch eine Aufheizung vor dem katalytischen Brenner erfolgen, der in den vorangegangenen Arbeiten als limitierende Komponente identifiziert wurde. In der zweiten Aufheizphase muss bei diesem Konzept auch Wasser verdampft werden. Zu diesem Zweck soll bei diesem Konzept der Reformer mit einer internen elektrischen Beheizung ausgestattet werden. Dieser wird in Form eines Heizdrahtes ausgeführt, der in den Wärmeübertrager des Reformers integriert wird. Dieser verdampft und überhitzt Wasser während des Startvorgangs, so dass der Reformer gezündet werden kann. Nachdem der Reformer gezündet wurde, wird das produzierte Reformat im katalytischen Brenner verbrannt und das Abgas strömt anschließend durch einen Wärmeübertrager. In diesem wird Wärmeträgeröl aufgewärmt, um die Brennstoffzelle auf die benötigte Temperatur aufzuheizen.

Eine Prinzipskizze der Verdampfungskammer im Reformer ist in Abbildung 5.7 dargestellt. Beim Startvorgang wird dem Reformer heiße Luft zugeführt. In diesem Fall soll die neue Reformergeneration ATR 12 verwendet werden. Sobald der Monolith eine Temperatur von 320 °C erreicht hat und der Taupunkt im System überschritten ist, muss Wasser verdampft werden. Dieses soll in den Wärmeübertrager des Reformers eingedüst werden, so wie es auch im stationären Zustand der Fall ist. Um das Wasser zu verdampfen und zu überhitzen wird der elektrische Heizdraht eingesetzt. Die Verdampfung und Überhitzung des Wassers geschieht während des Startvorgangs im selben Wärmeübertrager, in dem auch während des stationären Betriebs das Wasser verdampft und überhitzt wird. Während des stationären Betriebs wird der benötigte Wärmestrom jedoch durch das Reformat bereitgestellt.

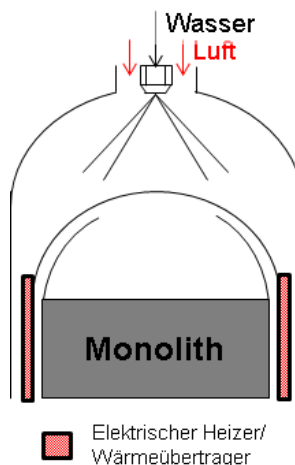
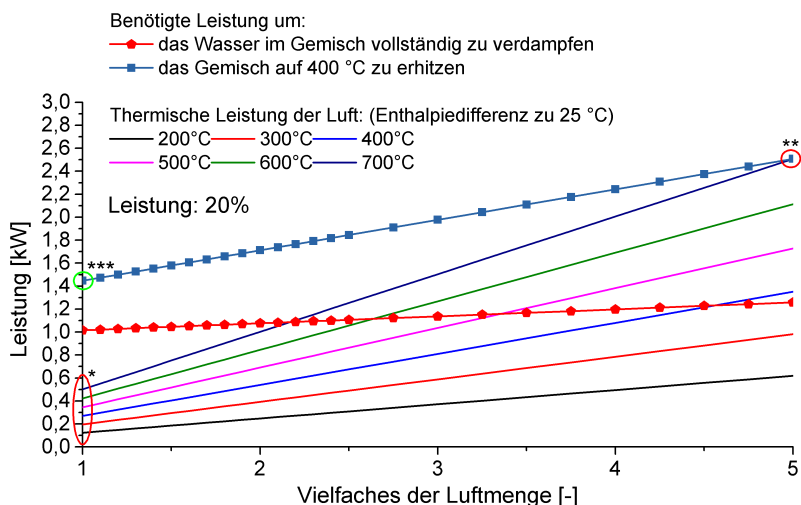


Abb. 5.7: Skizze der Verdampfungskammer des ATR 12



Dieses Konzept wurde hinsichtlich seiner Machbarkeit bewertet. Hierzu wurde die durch Luft einbringbare Leistung der benötigten Leistung für die Wasserverdampfung und -überhitzung gegenübergestellt. Die Ergebnisse dieser Gegenüberstellung sind in Abbildung 5.8 gezeigt.



- \* Bei der normalen Zusammensetzung reicht die Energiemenge nicht zum Verdampfen.
- \*\* Die 5-fache Luftmenge müsste mit 700 °C zugegeben werden, um das Gemisch auf 400 °C zu erhitzen.
- \*\*\* Eine Leistung von 1,45 kW reicht aus um das Gemisch auf 400 °C zu erhitzen.

Abb. 5.8: Leistungsbedarf für die Verdampfung von Wasser: Konzeptüberprüfung für die elektrische Verdampfung, Teillast 20 %

Bei diesem Konzept wurde von einer Zündung im niedrigen Teillastbereich ausgegangen. Das Diagramm bezieht sich auf eine Zündung mit 20 % der maximalen Leistung. Dieser Punkt wurde gewählt, um die benötigte Leistung während des Startvorgangs möglichst gering zu halten und auf der anderen Seite noch eine feine Tropfenverteilung der Kraftstoffeindüsung zu gewährleisten. Die durchschnittliche Tropfengröße wird für eine gegebene Düse mit abnehmender Leistung größer, bevor der austretende Kraftstoff als Strahl austritt. Das Auftreten eines Strahls muss auf jeden Fall vermieden werden. Der Betrieb bei 20 % Leistung soll durch eine pulsierende Einspritzdüse realisiert werden. Die Linien mit Datenpunkten repräsentieren die benötigte Leistung um das Wasser im Luft-/Wassergemisch vollständig zu verdampfen und die Leistung um das Gemisch von 25 °C auf 400 °C zu erhitzen. Die Gemischtemperatur von 400 °C wird benötigt, um den Reformier zünden zu können. Der Kraftstoff wird in dieses Gemisch eingedüst und durch die im Gemisch enthaltene Wärme vollständig verdampft. Die durchgezogenen Linien geben die thermische Leistung an, die durch die Luft eingetragen wird. Diese wurde aus der Enthalpiedifferenz zwischen der Eintrittstemperatur und 25 °C

für den Massenstrom berechnet. Die Luftmenge, die normalerweise bei diesen 20 % Leistung des Reformers zugegeben wird, entspricht in diesem Diagramm dem Schnittpunkt mit der y-Achse. Das Stoffmengenverhältnis zwischen molekularem Sauerstoff und Kohlenstoff beträgt an diesem Betriebspunkt 0,47. Es ist ersichtlich, dass die durch die Luft zugeführte thermische Leistung an diesem Betriebspunkt weder ausreicht, um das Wasser vollständig zu verdampfen, noch um das Gemisch auf 400 °C zu erhitzen. Weiterhin ist ersichtlich, dass mit zunehmender Luftmenge die thermische Leistung der Luft für die gegebenen Temperaturen stärker ansteigt, als die Kurve der zur Verdampfung benötigten Energie. Für die berechneten Temperaturen oberhalb von 300 °C liegt der Schnittpunkt der Leistungskurven der Luft mit der Kurve der benötigten Leistung für die Verdampfung innerhalb des Bereichs für die normale Luftmenge. So liegt die benötigte Luftmenge bei einer Eintrittstemperatur von 400 °C bei 90 % des maximalen Luftvolumenstroms im stationären Zustand. Die Kurve, um das Gemisch auf 400 °C zu erhitzen, verläuft parallel mit der Kurve der thermischen Leistung der Luft für eine Temperatur von 400 °C. Dies ist auf die konstante benötigte Leistung für die Verdampfung und Überhitzung des Wassers zurückzuführen. Für die Erhitzung des Wassers auf die Zieltemperatur von 400 °C ist somit nur die Enthalpiedifferenz zwischen der Eintrittstemperatur und der Solltemperatur von 400 °C nutzbar. Der einzige Schnittpunkt zwischen den Kurvenschar der Luft und der Kurve des Gemischs bei 400 °C ergibt sich für eine Eintrittstemperatur der Luft von 700 °C und der maximalen Luftmenge. Dieser Punkt soll jedoch aus mehreren Gründen nicht angefahren werden. Die Temperatur liegt oberhalb der maximalen Eintrittstemperatur in den Reformern von 600 °C und die Luftmenge reicht für eine vollständige Oxidation des Kraftstoffs aus, so dass die maximal erlaubten Temperaturen im Monolith überschritten werden können. Eine Verdampfung des Wassers durch vor dem Reformer aufgeheizte Luft ist deshalb keine Option für den Startvorgang. Es zeigt sich jedoch, dass bei den normalen  $O_2/C$  und  $H_2O/C$ -Verhältnissen bei 20 % Last eine elektrische Leistung von 1,45 kW benötigt wird, um das Gemisch vollständig zu verdampfen. Bei einer Eintrittstemperatur von 600 °C für die Luft wird eine zusätzliche elektrische Leistung von ungefähr 1 kW benötigt, um das Gemisch auf die gewünschte Temperatur zu bringen.

Das elektrische Startkonzept wurde ebenfalls durch eine dynamische Systemsimulation überprüft. Bei diesem Konzept muss das Brenngaserzeugungssystem zuerst aufgeheizt werden. Die Brennstoffzelle wird anschließend durch die Abwärme des Katalytbrenners aufgewärmt. Die simulierten Temperaturverläufe während des elektrischen Startvorgangs sind in Abbildung 5.9 gezeigt. Die Temperatur der Luft kann in diesem Fall direkt über die Leistung eingestellt und geregelt werden. Mit diesem Konzept kann so einfacher auf veränderte Randbedingungen reagiert werden. Die Brenngaserzeugungskomponenten werden zuerst mit Luft aufgewärmt. Kurz vor der Zündung des Reformers wird in den Reformer Wasser eingedüst und dieses direkt im Reformer durch die zusätzliche elektrische Beheizung mit einer Leistung von 1,5 kW verdampft. Der Reformer wird mit 20 % seiner maximalen Leistung gezündet und betrieben. Nachdem der Reformer in Betrieb genommen wurde, wird das Reformat mit einer Stöchiometrie von 4 im Katalytbrenner verbrannt. Das Abgas des Katalytbrenners gelangt anschließend in einen Wärmeübertrager, in dem Wärmeträgeröl für die Brennstoffzelle aufgeheizt wird. Für den Wärmeübertrager wurden zur besseren Vergleichbarkeit die gleichen Randbedingungen wie beim

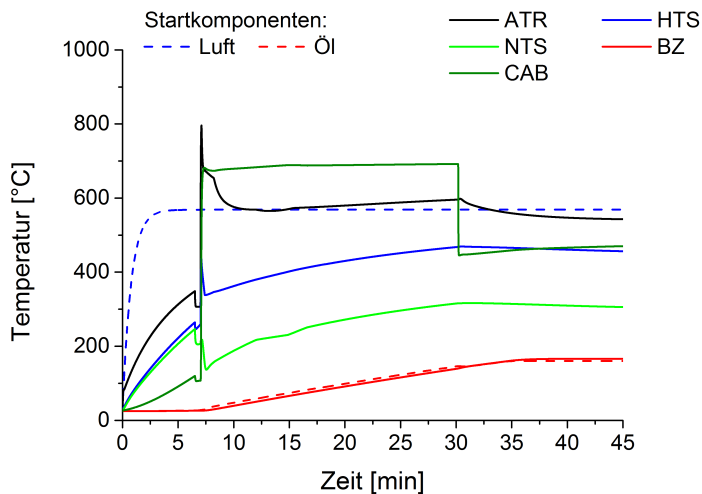


Abb. 5.9: Aufheizkurven bei dem elektrischen Startvorgang - Brenngaserzeugungssystem wird zuerst aufgewärmt

thermischen Startkonzept verwendet. Das Brenngaserzeugungssystem ist in diesem Fall nach 7 Minuten aufgewärmt. Das Brennstoffzellensystem benötigt 30 Minuten bis zur Stromproduktion. Der thermische Energiebedarf bei diesem Konzept beträgt 2,9 kWh.

### 5.1.3 Auswertung der Startkonzepte

Die Aufheizzeiten und der Energiebedarf für die verschiedenen Aufheizvorgänge sind in Tabelle 5.1 gegenübergestellt. Diese Simulationen geben einen ersten Eindruck über die Auswirkung auf den Systembetrieb. Beim thermischen Startkonzept ist es nachteilig das Brenngaserzeugungssystem zuerst aufzuheizen, da der Energiebedarf durch den gleichzeitigen Betrieb von Startbrenner und Reformier sehr stark ansteigt. Durch die vorgezogene Aufheizung der Brennstoffzelle sinkt der benötigte Energiebedarf für die Aufheizung. Die Aufheizzeit verzögert sich bei diesem Konzept jedoch von 42 Minuten auf 44 Minuten. Um die Aufheizzeit zu verkürzen, müsste der Brenner zusammen mit einem anderen Gebläse betrieben werden. Die Leistung des Brenners könnte bei einem konstanten Luftverhältnis erhöht werden, ohne das sich die Verbrennungstemperatur erhöht. Somit könnte die Brennstoffzelle schneller aufgeheizt werden. Der elektrische Startvorgang führte in der Simulation zu einer Verkürzung der Aufheizzeit, jedoch zu einem höheren Energiebedarf.

## 5.1. Entwicklung eines Anfahrkonzepts für das Brennstoffzellensystem

Startvorgang Zuerst aufgeheizte Komponente	thermisch Brenngaserzeugung	thermisch Brennstoffzelle	elektrisch Brenngaserzeugung
Aufheizzeit BGE/ BZ [min]	10,9 / 41,8	43,3 / 44,4	7,0 / 30,2
elektr. Energiebedarf [kWh]	0,07 / 0,22	0,28 / 0,28	0,29 / 0,34
therm. Energiebedarf [kWh]	0,85 / 6,28	2,37 / 2,58	0,00 / 2,91

Tabelle 5.1: Vergleich der thermischen und elektrischen Aufheizkonzepte

Die benötigte Energiemenge wird entscheidend durch den Wärmeübertrager nach dem Katalytbrenner beeinflusst. Für den elektrischen Startvorgang wurde der gleiche Wärmeübertrager zur Aufheizung des Wärmeträgeröls wie beim thermischen Startvorgang verwendet. Die zur Verfügung stehende Wärmemenge ist bei der Verwendung des Katalytbrennerabgases mit 5,3 kW im Vergleich zu 3 kW als Startbrennerleistung deutlich höher. Die übertragene Wärmemenge ergibt sich im Fall des thermischen Konzeptes zu 2,05 kW und beim elektrischen Startvorgang zu 3,45 kW. Durch einen größeren Abgas/Öl-Wärmeübertrager kann die Aufheizzeit der Brennstoffzelle deutlich reduziert und die benötigte Energiemenge gesenkt werden. Dies erfordert jedoch eine Detailoptimierung im Rahmen des Packages für eine gegebene Brennstoffzelle. Der Wärmeübertrager muss dann so ausgelegt werden, dass an keiner Stelle die maximale Temperatur des Wärmeträgeröls überschritten wird. Die hier berechneten Startvorgänge dienen als Ausgangspunkt für die Hybridisierung. Der thermische Startvorgang führt mit einer vorgezogenen Brennstoffzellenaufheizung zu einem geringeren Energieverbrauch. Die Aufheizzeit ist jedoch mit 44 Minuten im Vergleich zu den 30 Minuten des elektrischen Startvorgangs sehr lang. Weiterhin ist bei dem thermischen Konzept die Steuerung der Temperaturen sehr aufwendig und muss bei der Entwicklung des Wärmeübertragers berücksichtigt werden. Dies geschieht für den Wärmeübertrager nach dem Startbrenner im Rahmen des Packagings in Kapitel 7. Bei dem elektrischen Konzept ist die Steuerung der Temperaturen deutlich einfacher. Durch eine Optimierung der Wärmeübertrager kann die benötigte Energie reduziert werden. Zu diesem Zeitpunkt kann keines der Konzepte ausgeschlossen werden, so dass beide Konzepte weiter verfolgt werden.

## 5.2 Strömungsdynamische Modellierung des Startvorgangs

Die dynamischen Systemsimulationen geben einen Eindruck über die verschiedenen Zustände während der Aufheizung des Systems und erlauben einen Vergleich zwischen den verschiedenen Aufheizkonzepten. Strömungsdynamische Simulationen wurden andererseits in der Vergangenheit verwendet, um die Brenngaserzeugungskomponenten auszulegen. Diese Simulationen sind wesentlich genauer und detaillierter als die dynamischen Systemsimulationen. Diese sollen deshalb auch für die Optimierung des Startvorgangs verwendet werden. In diesem Kapitel wird zuerst auf die zeitaufgelöste Modellierung der porösen Körper eingegangen. Als zweiter Schritt wird eine Methodik zur dynamischen Kopplung der einzelnen Reaktoren in einer zweidimensionalen Simulation vorgestellt. Die zweidimensionale Simulation wird aufgrund der reduzierten Rechenzeit gewählt. Auf die dreidimensionalen Simulationen wird im Kapitel 8 eingegangen, indem ein gesamtes Brenngaserzeugungspackage dynamisch simuliert wird. Dieses Kapitel wird durch die Anwendung des zweidimensionalen Modells auf zwei Brenngaserzeugungspackages abgeschlossen. Für das Brenngaserzeugungspackage basierend auf dem ATR 12 wurde eine Optimierung des Startvorgangs durchgeführt.

### 5.2.1 Erstellung eines transienten Modells für den Startvorgang

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein transientes CFD-Modell für den Aufheizvorgang des Systems entwickelt. In diesem Modell kommt der Betrachtung des Monolithen eine besondere Rolle zu. Hierzu wurden verschiedene Modelle für die Simulation des Monolithen untersucht und experimentell validiert. Weiterhin wurden die einzelnen Reaktoren dynamisch miteinander gekoppelt, um die Simulation für das Gesamtsystem durchführen zu können.

#### 5.2.1.1 Modellierung der porösen Medien

Die Monolithen werden in den strömungsdynamischen Simulationen als poröse Körper modelliert. Die verschiedenen Modelle wurden bereits in Kapitel 4.1.4.4 erklärt. Die Wärmeflüsse der verschiedenen Modelle sind in Abbildung 5.10 dargestellt.

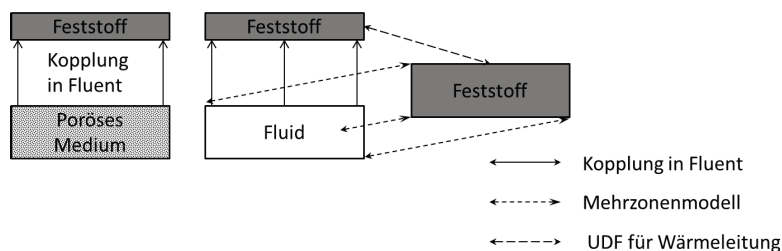


Abb. 5.10: Thermische Kopplung des porösen Mediums: Einzonnenmodell (links) und Mehrzonenmodell (rechts)

Bei diesen Modellen handelt es sich um das auf Gleichung 4.30 basierende Einzonenmodell und das auf den Gleichungen 4.32 und 4.33 basierende Zweizonenmodell. Das Einzonenmodell ist in Abbildung 5.10 links dargestellt. Bei diesem Modell wird eine gemeinsame Temperatur für den Feststoff und die Gasphase des porösen Mediums berechnet. Aus diesem Grund wird dieses Modell auch als Modell des thermischen Gleichgewichts bezeichnet. Beim Zweizonenmodell werden die Gasphase und der Feststoff jeweils durch eine eigene Temperatur berücksichtigt. Hierzu wird bei der Verwendung dieses Modells das Rechnernetz in diesem Bereich dupliziert. Durch die Duplizierung des Rechengitters kann auf dem einen Gitter Gleichung 4.32 und auf dem anderen Gleichung 4.33 gelöst werden. Dieses Modell lässt es zu, dass unterschiedliche Temperaturen in beiden Phasen vorliegen. Dies ist besonders bei transienten Vorgängen wichtig. Der Wärmeübergang zwischen diesen beiden Phasen wird, wie in Kapitel 4.1.4.4 beschrieben, durch einen Wärmeübergangsterm berechnet. Für den Wärmeübergang in porösen Medien gibt es in der Literatur verschiedene Korrelationen [92], [93]. In [92] wird die Nusselt-Zahl basierend auf der Form des Kanals berechnet. Die Korrelation besitzt keine Abhängigkeit von dem Strömungszustand in den einzelnen Kanälen. Daher wurde in dieser Arbeit die Korrelation nach Schlegel et al. [93] entsprechend Gleichung 5.1 verwendet.

$$Nu = 0.81 \cdot \left( 3,66^3 + 1,66^3 \cdot Re \cdot Pr \cdot \frac{0.00093}{0,15} \right)^{0,333} \quad (5.1)$$

Die Korrelation nach Gleichung 5.1 wurde dann durch eine benutzerdefinierte Funktion (UDF) in das instationäre Modell des porösen Körpers integriert. In dieser Funktion wurde die Reynoldszahl für die entsprechende Zelle und daraus die Nusseltzahl und der Wärmeübergangswert berechnet. Neben dem porösen Medium mussten weitere Randbedingungen berücksichtigt werden. Die Simulation wurde zweidimensional durchgeführt. Die nicht rotationssymmetrischen Bauteile mussten für die zweidimensionale Simulation vereinfacht werden. Für den Drallkörper am Eintritt in die Mischkammer wurde die tangentielle Geschwindigkeit durch eine benutzerdefinierte Funktion über die Zusammenhänge aus dem Geschwindigkeitsdreieck aus der radialen Geschwindigkeit berechnet. Die Strömungsverhältnisse in der Mischkammer können durch die Verwendung der UDF auch bei einer zweidimensionalen Berechnung angenähert werden. Für die nicht rotationssymmetrische Rohrwendel muss ebenfalls ein weiteres Modell angewendet werden. Zur Berechnung der Temperaturen im Inneren des Wärmeübertragerrohres wurde das in Kapitel 3 vorgestellte Modell von Scharf [25] in eine benutzerdefinierte Funktion übertragen. Von dieser Funktion wurden die Wärmeströme durch die Rohrwendel ausgelesen und basierend darauf Temperaturen in der Rohrwendel berechnet. Diese Temperaturen werden von der UDF wiederum als Randbedingungen der Simulation gesetzt. Um die Dauer einer Simulation zu reduzieren, wurden die benutzerdefinierten Funktionen parallelisiert, sodass die Rechnung weiterhin auf mehreren Prozessoren durchgeführt werden konnte.

### 5.2.1.2 Validierung des Modells

Um die Genauigkeit des Modells zu überprüfen, müssen die Simulationsergebnisse mittels experimenteller Daten validiert werden. Zu diesem Zweck wurden mit dem Jülicher Brennstoffzellensystem Versuche durchgeführt. Das Fließbild des Versuchsaufbaus ist in Abbildung 5.11

dargestellt. Das Hauptaugenmerk bei der Simulation liegt auf der Validierung des Modells des porösen Körpers. Zum Aufheizen des Systems wird Luft in einer Heizpatrone erwärmt, durch den Wärmeübertrager des Reformers geleitet, und in einer zweiten Heizpatrone ebenfalls erwärmt und in den Dampfraum des Reformers geleitet. Sobald die Temperatur von 120 °C an der kältesten Stelle überschritten ist, wird zuerst Luft in den Luftstrang geleitet und anschließend Wasser zugegeben und die Luftzufuhr durch den Wasserstrang reduziert. Um die Kondensation von Wasser zu vermeiden, wird das System zuerst mit Luft aufgewärmt. Bei dem aktuellen Aufbau kann die Luft nur über den Wasserstrang aufgeheizt werden. Der direkte Luftstrang kann nicht beheizt werden. Deshalb wird die Luftzufuhr über diesen Strang während der Aufheizung ausgeschaltet.

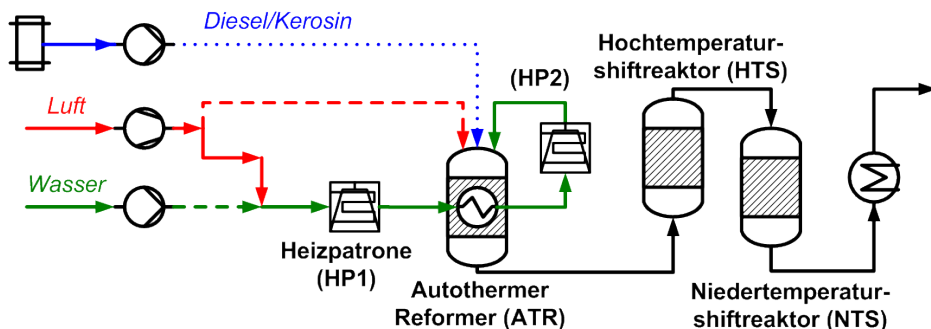


Abb. 5.11: Fließbild des Versuchsaufbaus im Teststand

Mit diesem Versuchsaufbau wurde der Aufheizvorgang des Reformers ATR 9.2 untersucht. Hierzu wurde in der zweiten Heizpatrone (HP2) Luft auf 400 °C erhitzt. Diese Luft wurde dann in die Mischkammer des Reformers geleitet und es wurde an verschiedenen Stellen die Temperatur aufgezeichnet. Hinsichtlich der Position im Monolithen wurde eine Fehlerabschätzung aufgrund der Position im Monolithen durchgeführt. Hierzu wurden Simulationen durchgeführt und die Temperatur wurde an der Stelle, an der das Thermoelement sitzen soll, und jeweils 2 mm stromab- und aufwärts ausgelesen. Die Simulation ergab, dass bei einem Volumenstrom von 12000 NI/h die Temperaturabweichung während der Aufheizung bei einer Verschiebung des Thermoelements an allen Messstellen im Monolithen weniger als 2 K beträgt. Die simulierten Temperaturverläufe befinden sich im Anhang. Die Temperatur direkt nach der Heizpatrone wurde auch aufgezeichnet. Da die Heizpatrone nicht direkt am Eintritt in die Mischkammer sitzt, wie es bei der zweidimensionalen Simulation angenommen werden muss, wurde der Einfluss der Berohrung zwischen der Heizpatrone und dem Reformer in einer dreidimensionalen Berechnung untersucht. Hierzu wurde der Temperaturverlauf als transientes Profil am Eingang der Berohrung vorgegeben und die Antwort am Austritt aus der Berohrung aufgezeichnet. Durch die Verrohrung werden kurzzeitige Überschwinger der Heizpatrone ausgeglichen und die Aufheizzeit verlängert. Für einen Volumenstrom von 12000 nl/h wurde im Experiment eine Lufttemperatur von 300 °C direkt nach der Heizpatrone nach 147 s erreicht. Diese Temperatur wird für diesen Volumenstrom nach 195 s am Eintritt in den Reformer er-

reicht. Für einen Volumenstrom von 6000 nl/h werden die 300 °C nach 233 s erreicht, wobei die Heizpatrone bereits nach 166 s diese Temperatur erreicht. Die Temperaturprofile am Eintritt in den Reformier wurden als Randbedingung für die dynamische Simulation gewählt. Die Abweichung zwischen dem Rohr- und dem Reformiereintritt sind im Anhang dargestellt. Mit den Volumenströmen und den dynamischen Temperaturprofilen wurden Aufheizsimulationen mit beiden thermischen Modellen des porösen Körpers durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Simulationen sind in Abbildung 5.12 den experimentellen Ergebnissen gegenübergestellt.

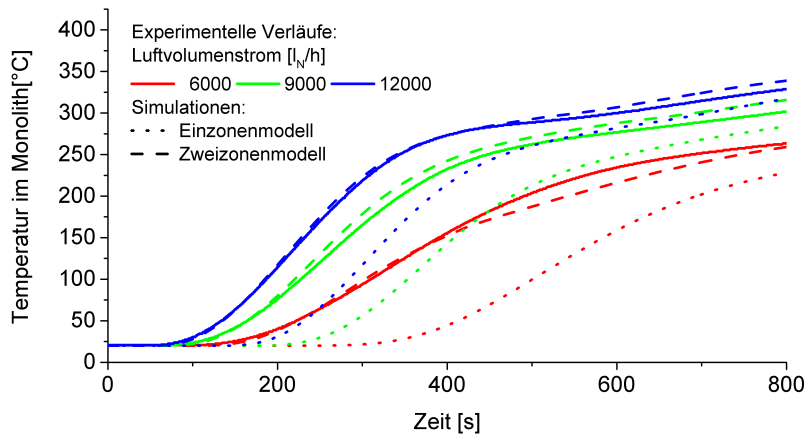


Abb. 5.12: Validierung der verwendeten CFD-Modelle für die Modellierung des porösen Mediums

Die experimentellen Daten sind durch die durchgezogenen Linien gezeigt. Die Simulationen wurden mit dem Ein- und dem Zweizonenmodell durchgeführt. Das Einzonenmodell, welches einen unendlich hohen Wärmeübergangskoeffizienten entspricht, führt zu einer deutlich verzögerten Aufheizung. Die simulierten Temperaturverläufe sind durch gepunktete Linien dargestellt. Bis eine Temperatur von 120 °C erreicht ist, benötigt der Monolith im Experiment bei 12000 NI/h 206 Sekunden im Vergleich zu 303 Sekunden, die mit dem Einzonenmodell simuliert wurden. Bei dem kleinsten untersuchten Volumenstrom von 6000 NI/h ist diese Abweichung noch größer. Für diesen Volumenstrom ergibt sich die Aufheizzeit bis zu einer Temperatur von 120 °C in der Simulation zu 534 Sekunden, im Vergleich zu 342 Sekunden im Experiment. Die Simulation mit dem Zweizonenmodell, die durch gestrichelte Linien dargestellt ist, liefert hier entscheidend bessere Werte. Bei dem Volumenstrom von 12000 NI/h wird eine Aufheizzeit von 203 Sekunden im Vergleich zu den experimentell ermittelten 206 Sekunden bestimmt. Bei dem geringsten Volumenstrom beträgt die Abweichung 5 Sekunden. Die Abweichung in der Temperatur wurde für 2 Zeitpunkte exemplarisch bestimmt. Bei dem höchsten Volumenstrom führt das Zweizonenmodell nach 300 Sekunden zu einer Abweichung von 4 K und das Einzonenmodell zu einer Abweichung von 102 K. Für den niedrigsten Volumenstrom beträgt



diese Abweichung bei 400 Sekunden 3 K (Zweizonenmodell) bzw. 111 K (Einzonenmodell). Das Modell des thermischen Gleichgewichts, welchem die Annahme eines unendlich großen Wärmeübergangskoeffizienten zu Grunde liegt, ist für den Fall der Aufheizung nicht geeignet. Das Zweizonenmodell bildet das Aufheizverhalten des Monolithen sehr gut ab und wird für die folgenden Simulationen verwendet.

### 5.2.1.3 Kopplung der einzelnen Reaktoren

Durch die Validierung des Modells für den porösen Körper kann der Monolith zweidimensional simuliert werden. Bei der Simulation eines gesamten Reaktors mit integriertem Wärmeübertrager trifft die Annahme eines rotationssymmetrischen Bauteils nicht mehr zu. Dies ist vor allem bei den Ein- und Austritten und bei internen Verrohrungen der Fall. Um den Startvorgang zu berechnen, muss das Modell in der Lage sein, die Hauptkomponenten des Brenngaserzeugungssystems gekoppelt zu simulieren. Die Verbindung der einzelnen Komponenten kann in einer zweidimensionalen Berechnung nicht realitätsgetreu dargestellt werden. Diese Problematik ist am Beispiel des Wassergasshift-Reaktors in Abbildung 5.13 dargestellt.

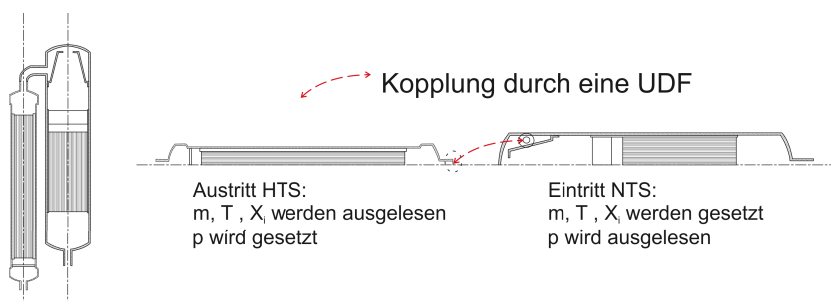


Abb. 5.13: Geometrieaufbereitung bei der 2D Simulation

Links im Bild ist die Anordnung der beiden Stufen in der Realität dargestellt. Das Reformat strömt aus dem HTS und tritt tangential in den NTS ein. Die beiden Reaktoren können näherungsweise als rotationssymmetrisch betrachtet werden. In der 2D-Simulation des Brenngaserzeugungssystems werden die Komponenten alle in einen Strang hintereinandergeschaltet. Eine Anordnung nebeneinander ist nicht möglich, da nur die Achse als Rotationsachse verwendet werden kann. Die Verbindung zwischen HTS und NTS muss über benutzerdefinierte Funktionen realisiert werden. Im Strömungslöser wird der Massenstrom am Eintritt und der Druck am Austritt vorgegeben. Der Massenstrom am Austritt und der Druck am Eintritt folgen aus den strömungsdynamischen Berechnungen. Eine Änderung des Massenstroms wirkt sich in einer Änderung des Drucks aus. Am Austritt aus dem HTS wird der Massenstrom, die Temperatur und die Stoffmengenanteile ausgelesen. Diese werden durch die UDF an den Eintritt des NTS übergeben. Am Eintritt des NTS wiederum wird der Druck ausgelesen. Dieser wird an den Austritt des HTS übergeben. Durch diese Kopplung ist es möglich, die beiden Komponenten dynamisch gekoppelt zu simulieren. Die Druckkopplungsbedingung ist in Gleichung 5.2 dar-

gestellt. Die Schwierigkeit bei dieser Kopplung ist, dass Druck und Massenstrom voneinander abhängig sind. Durch diese Kopplung kommt es zu einem Aufschwingen des Systems.

$$P_{(HTS)} = P_{(NTS)} \quad (5.2)$$

Um dieses Aufschwingen zu verhindern, werden nur der Massenstrom und die Temperatur direkt übergeben. Der Druck wird ausgelesen und basierend darauf eine Druckänderung zur vorherigen Iteration berechnet. Diese Änderung wird mit einem Unterrelaxationsfaktor multipliziert und dann zu dem Druck der vorherigen Iteration addiert. Dieser Zusammenhang ist in Gleichung 5.3 dargestellt.

$$P_{(HTS,n+1)} = P_{(HTS,n)} + (P_{(NTS)} - P_{(HTS,n)}) * URF \quad (5.3)$$

Durch diese neue Kopplungsbedingung kann eine Konvergenz durch einen kleinen Unterrelaxationsfaktor URF hergestellt werden. Nur ein sehr kleiner URF von 0,03 oder kleiner führt zur Konvergenz der Lösung. Die Größe dieses Faktors spielt für die benötigte Anzahl an Iterationen eine Rolle. Die berechnete Änderung von einer Iteration zur nächsten wird mit diesem Faktor multipliziert. Diese Bedingung wird jedoch nur punktuell an einer Stelle angewendet und spielt zu Beginn der Simulation eine entscheidende Rolle. Der Druck ändert sich während der Simulation sehr langsam, sodass die normale Anzahl an Iterationen auch für die Druckgleichung ausreicht.

### 5.2.2 Strömungsdynamische Optimierung des Aufheizverhaltens

Das erstellte transiente Modell des Brenngaserzeugungssystems wurde verwendet, um die Einflussfaktoren auf das Aufheizverhalten zu untersuchen. In den ersten Simulationen wurde das Brenngaserzeugungssystem bestehend aus dem ATR 9.2, dem WGS 4 und dem CAB 3 untersucht. Die Reaktoren wurden bei der Simulation wie im vorherigen Kapitel beschrieben in einem Strang hintereinander geschaltet und zweidimensional berechnet. Diese Aufheizung wurde mit verschiedenen Leistungen durchgeführt. Der Massenstrom wurde bei diesen Simulationen so eingestellt, dass sich die Temperatur bei dieser Leistung zu 550 °C ergibt. Beim Reformertreten, wie bereits erwähnt, die beiden temperaturabhängigen Ereignisse bei 120 °C, bei der die Wasserdampfzufuhr gestartet wird, und bei 320 °C, bei der der Reformier gezündet werden kann, auf. In Abbildung 5.14 sind die Temperaturverläufe zum Zeitpunkt, in dem die beiden Temperaturgrenzen erreicht werden, dargestellt. Im linken Bild kann die Wasserdampfzufuhr starten und im rechten Teil wäre der Reformier zündbereit. Bei beiden Temperaturgrenzen ist jeweils links der Fall mit einer Leistung von 1 kW und rechts der Fall mit einer Leistung von 3 kW dargestellt. Die Leistung bezeichnet die dem Luftmassenstrom zugeführte Leistung. Die Luft wird von 25 °C auf die Eintrittstemperatur erhöht. Der Luftmassenstrom wird aus der zugeführten Leistung und der spezifischen Enthalpiedifferenz aufgrund der Temperaturänderung berechnet. Wie die Leistung der Luft zugeführt wird, spielt bei dieser Simulation keine Rolle. Im Folgenden wird zuerst auf den Aufheizzeitpunkt eingegangen, bei dem der Monolith eine Temperatur von 120 °C erreicht. Der Bereich der Mischkammer ist bei einer Leistung von

1 kW mit einer Temperatur von ca. 300 °C bei diesem Fall noch relativ kalt. Im Bereich des Wärmeübertragers beträgt die Temperatur ca. 150 °C. Bei einer höheren Leistung von 3 kW ist die Temperatur in der Mischkammer mit bis zu 450 °C deutlich höher.

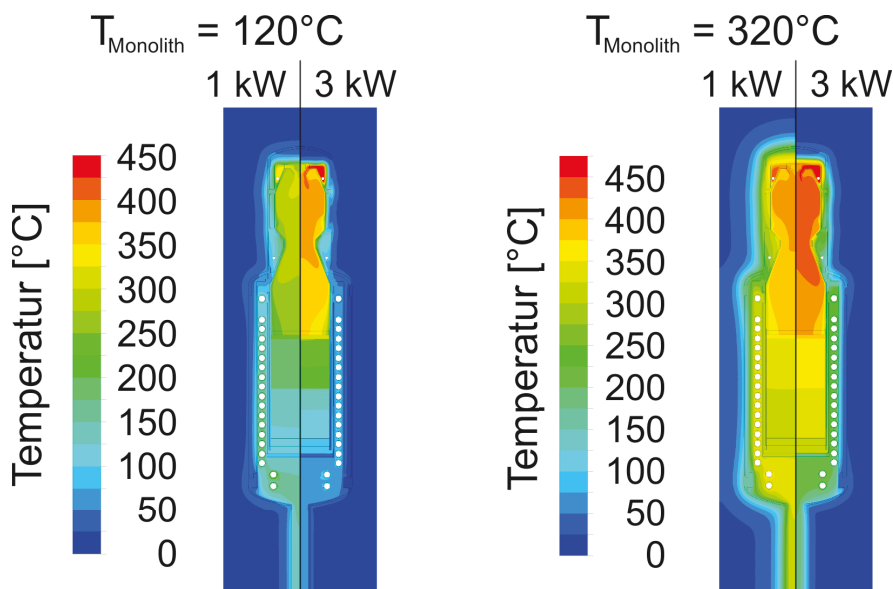


Abb. 5.14: Temperaturprofile im Reformer ATR 9.2 während des Aufheizvorgangs

Dies ist auf den im Verhältnis zur Gesamtleistung geringeren Wärmeübergang zurückzuführen. Dieser Zusammenhang ist auch an der Temperatur von weniger als 100 °C im Bereich des integrierten Wärmeübertragers zu erkennen. Bei kleinen Aufheizleistungen wird ein prozentual größer Anteil der Heizleistung durch den Wärmeübertrager zum Ausgang des Reformers übertragen, ohne damit den Monolithen aufzuwärmen. Der Temperaturverlauf zum Zeitpunkt, in dem der Monolith die Temperatur von 320 °C erreicht, ist im rechten Teil der Abbildung 5.14 dargestellt. Analog zum linken Teil zeigen sich auch hier bei höheren Leistungen die höheren Temperaturen im Bereich der Mischkammer und die niedrigeren Temperaturen im Bereich des Wärmeübertragers. In dieser Abbildung zeigt sich noch deutlicher, dass sich bei niedrigeren Leistungen auch die Isolierung der Reaktoren bis zur Zündbereitschaft stärker aufwärmen. Die Aufheizdauer des Reformermonolithen auf 120 °C beträgt bei 1 kW 435 Sekunden und bei 3 kW 86 Sekunden. Bis der Reformer zündbereit ist, dauert es bei einer Leistung von 1 kW 1912 Sekunden und bei 3 kW 268 Sekunden. Hier zeigt sich deutlich, dass der Reformer mit einem möglichst hohen Volumenstrom aufgeheizt werden sollte. Der Massenstrom an Luft beträgt bei 1 kW 47 % des maximalen Luftmassenstroms bei Volllast und bei 3 kW dementsprechend 140 %. Die folgenden Simulationen wurden mit einer Leistung von 2 kW durchgeführt.

Die Aufheizzeiten der Brenngaserzeugungskomponenten sind für eine Leistung von 2 kW in Abbildung 5.15 dargestellt. Bei den durchgeführten Simulationen wurde der Massenstrom so eingestellt, das sich aus der Enthalpiedifferenz zwischen der Umgebungstemperatur von 25 °C und der Lufteintrittstemperatur diese Leistung ergibt. Es wurden Brenngaserzeugungssysteme bestehend aus einem Reformer, dem WGS 4 und dem CAB 3 untersucht. Die Simulationen wurden sowohl mit dem Reformer ATR 9.2 als auch mit dem ATR 12 durchgeführt. Bei der Verwendung des ATR 9.2 ist der Reformer zuerst auf 120 °C aufgeheizt. Nach ungefähr 8 Minuten sind die zur Zündung benötigten Temperaturen im Reformer erreicht. Der Wassergasshiftreaktor überschreitet nach 7 Minuten (1.Stufe) und nach 14 Minuten (2.Stufe) die 120 °C. Der katalytische Brenner ist mit 27 Minuten die limitierende Komponente bei der Zündung des Reformers. Diese Aufheizzeiten ändern sich deutlich bei der Verwendung des ATR 12. Die Komponente, die zuerst die 120 °C überschreitet, ist für diesen Fall der Hochtemperaturshiftreaktor und dieser erreicht diese Temperatur nach 3 Minuten. Der Reformer benötigt 7 Minuten, bis er diese Temperatur erreicht. Danach folgt der Niedertemperaturshiftreaktor mit 8 Minuten und der Katalytbrenner mit 17 Minuten. Erst bei etwa 22 Minuten ist der Reformer zündbereit.

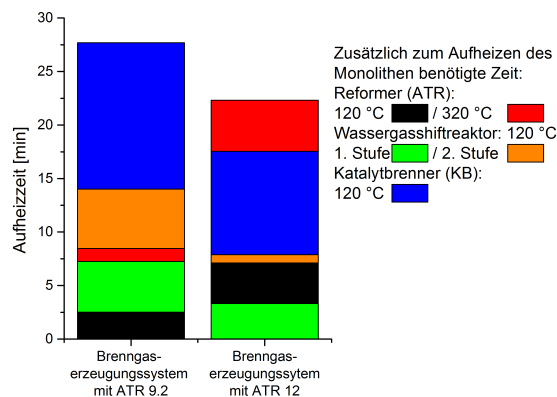


Abb. 5.15: Aufheizzeiten der Brenngaserzeugungskomponenten mit verschiedenen Reformer-generationen

Die Temperaturprofile während des Aufheizvorgangs sind für die beiden Reaktoren ATR 9.2 und ATR 12 zum Vergleich in Abbildung 5.16 dargestellt. Diese Simulationen wurden mit einer Lufteintrittstemperatur von 600 °C und einer zugeführten Leistung von 2 kW durchgeführt. Basierend auf der Leistung und der Eintrittstemperatur wurde der Massenstrom der Luft thermodynamisch berechnet. Bei dem ATR 9.2 wird durch den Rohrwendelwärmeübertrager heiße Luft zugegeben. Der Wärmeübergang zwischen dem Fluid innerhalb der Rohrwendel und der Rohrwendelwand wird über eine *user defined function* berechnet. Das Fluid strömt nach dem Wärmeübertrager über die externe Verrohrung in die Mischkammer des Reformers und

erwärmt dort den Monolithen.

Beim ATR 12 wird die heiße Luft oben durch den Dampfweg zugeführt. Diese strömt anschließend durch den Wärmeübertrager und durch die interne Verrohrung in die Mischkammer des Reformers. Der Reformer ist im Vergleich zum ATR 9.2 um  $180^\circ$  gedreht. Dies ist durch die Wassereindüsung bedingt. So soll verhindert werden, dass sich flüssiges Wasser ansammeln kann. Die Temperaturprofile des Reformers ATR 9.2 sind in Abbildung 5.16 oben dargestellt. Die Temperaturprofile sind in 5 Minuten-Schritten dargestellt. Der ATR 9.2 wärmt sich von der Mischkammer ausgehend auf. In dem Rohrwendelwärmeübertrager wird nur ein geringer Teil der Wärme übertragen, sodass die Luft bereits nach 300 s mit über  $400^\circ\text{C}$  in die Mischkammer strömt. Die heiße Luft wärmt dann den Monolithen und zum Schluss den Bereich um den Wärmeübertrager im Reformer auf. Beim Reformer ATR 12 (Abb. 5.16 unten) wird ein größerer Teil der Wärme im Wärmeübertrager abgegeben. Somit verlässt ein Teil der Wärme den Reformer direkt wieder. Dies wirkt sich positiv auf die nachfolgenden Komponenten aus. Für den Reformer bedeutet dies jedoch eine verzögerte Aufheizung. Die Gase am Austritt des Reformers sind heißer, als im Austritt des Monolithen.

Die Simulation ergab für den ATR 9.2, dass der Monolith nach 500 Sekunden die  $320^\circ\text{C}$  erreicht hat. Nachdem der Reformer die für die Zündung benötigten Temperaturen erreicht hat, werden zusätzliche 1150 Sekunden benötigt, bis im gesamten System der Taupunkt überschritten ist. Erst zu diesem Zeitpunkt kann die Wasserzufuhr starten. Bis das gesamte System aufgeheizt ist, erreicht der Monolith Temperaturen oberhalb von  $450^\circ\text{C}$ . Beim Reformer ATR 12 wird in dem integrierten Wärmeübertrager ein großer Teil der zugeführten Wärmemenge an den austretenden Stoffstrom übertragen. Dies führt dazu, dass der Reformer erst nach 22 Minuten die benötigte Temperatur von  $320^\circ\text{C}$  erreicht hat. Die Aufheizung des Reformers ist in diesem Fall der limitierende Schritt während des Startvorgangs. Die Temperaturen im Reformer sind bei der Zündung im Fall des ATR 12 deutlich niedriger, als im Fall mit dem Reformer ATR 9.2.

Eine Untersuchung hinsichtlich des Einflusses der Eintrittstemperatur ist in Abbildung 5.17 gezeigt. Bei dem Brenngaserzeugungssystem mit dem Reformer ATR 9.2 wird die Aufheizzeit bis das System komplett aufgewärmt ist durch eine niedrigere Eintrittstemperatur der Luft bei der konstanten Leistung verkürzt. Dies ist auf die schnellere Aufheizung des Wassergasshiftreaktors und des Katalytbrenners zurückzuführen. Der Reformer benötigt bei der niedrigeren Temperatur minimal länger bis er zündbereit ist. Dies fällt jedoch nicht ins Gewicht, da der Reformer nach 9 Minuten zündbereit ist und die Aufheizung der restlichen Komponenten jedoch insgesamt 24 Minuten dauert. Bei dem Brenngaserzeugungssystem mit dem Reformer ATR 12 setzt sich dieser Trend fort. Hier wird die Aufheizung des Katalytbrenners von 17,5 auf 15,7 Minuten reduziert. Die Aufheizzeit des Systems verlängert sich in diesem Fall jedoch von 22,3 auf 23,7 Minuten. Die limitierende Komponente ist in diesem Fall der Monolith des Reformers, der auf  $320^\circ\text{C}$  aufgewärmt werden muss. Diese Ergebnisse zeigen bereits, dass der ideale Aufheizvorgang stark vom verwendeten Reaktordesign abhängt.

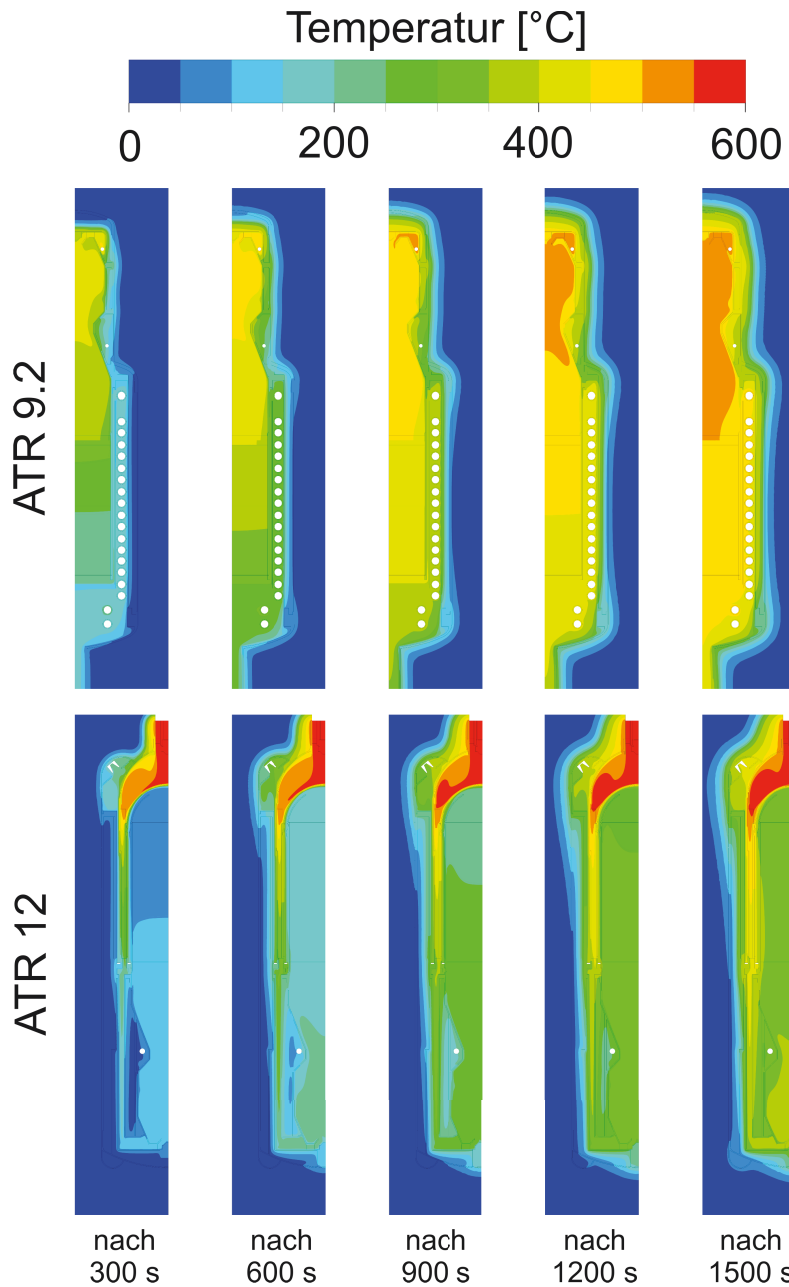


Abb. 5.16: Temperaturprofile während des Aufheizvorgangs im Reformer ATR 9.2 (oben) und ATR 12 (unten) bei einer Leistung von 2 kW und einer Lufteintrittstemperatur von 600 °C

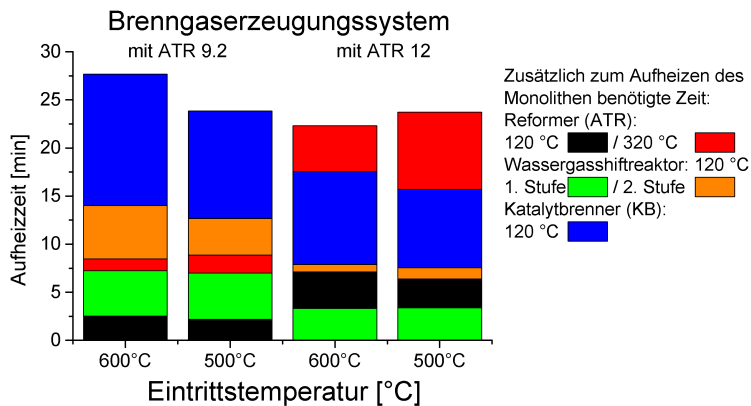


Abb. 5.17: Aufheizzeiten der Brenngaserzeugungskomponenten mit verschiedenen Reformer-generationen bei einer verwendeten Leistung von 2 kW

Für den ATR 12 wurde basierend auf der Aufheizung mit einer Eintrittstemperatur von 600 °C der Startvorgang weiter optimiert. Mit dem erstellten Modell wurden verschiedene Konzepte zur Beschleunigung des Aufheizvorgangs untersucht. Dazu gehörten eine zusätzliche Beheizung oder eine zusätzliche Zufuhr von heißer Luft vor dem Katalytbrenner, eine interne Beheizung im Reformer, die Aufheizung mit Wasserdampf und die Aufteilung der heißen Luft auf verschiedene Zuleitungen. Der Vergleichsfall ist der oben beschriebene Fall, indem die heiße Luft über den Dampfweg des Reformers ATR 12 mit einer Eintrittstemperatur von 600 °C und einer Leistung von 2 kW zugegeben wird (Fall I). Die Ergebnisse dieser Simulationen sind in Abbildung 5.18 gegenübergestellt. Unterhalb der Säulen ist jeweils der betrachtete Fall angegeben und oberhalb der Säule die konstante Leistung während des Aufheizvorgangs. Die einzelnen Elemente der Säulen repräsentieren die zusätzliche Zeit, die benötigt wird, um eine Komponente aufzuheizen, ausgehend von dem Zeitpunkt, an dem die späteste vorherige Komponente ihr Temperaturziel erreicht hat. Die insgesamt benötigte Aufheizzeit kann aus der Höhe der gesamten Säule abgelesen werden.

Eine interne Aufheizung vor dem Katalytbrenner (Fall IIa) führt zu einer deutlich verkürzten Aufheizzeit des Katalytbrenners. Der Katalytbrenner erreicht nach 5 Minuten die Temperatur von 120 °C anstatt nach 17 Minuten. Die Aufheizzeiten der anderen Komponenten ändern sich durch diese Wärmezufuhr nicht. Weiterhin wurde die Zugabe von Luft mit einer Eintrittstemperatur von 600 °C und einer Leistung von 0,5 kW untersucht. In diesem Fall (Fall IIb) wurde die Aufheizzeit des Katalytbrenners von 17 Minuten auf 8 Minuten verkürzt. Der Katalytbrenner ist für diesen Fall zeitgleich mit dem Reformer auf 120 °C aufgewärmt. In diesem Fall wirkt sich, im Vergleich zur internen Aufheizung vor dem Katalytbrenner, die geringere Temperatur negativ auf das Aufheizverhalten aus. Um den Startvorgang weiter zu beschleuni-

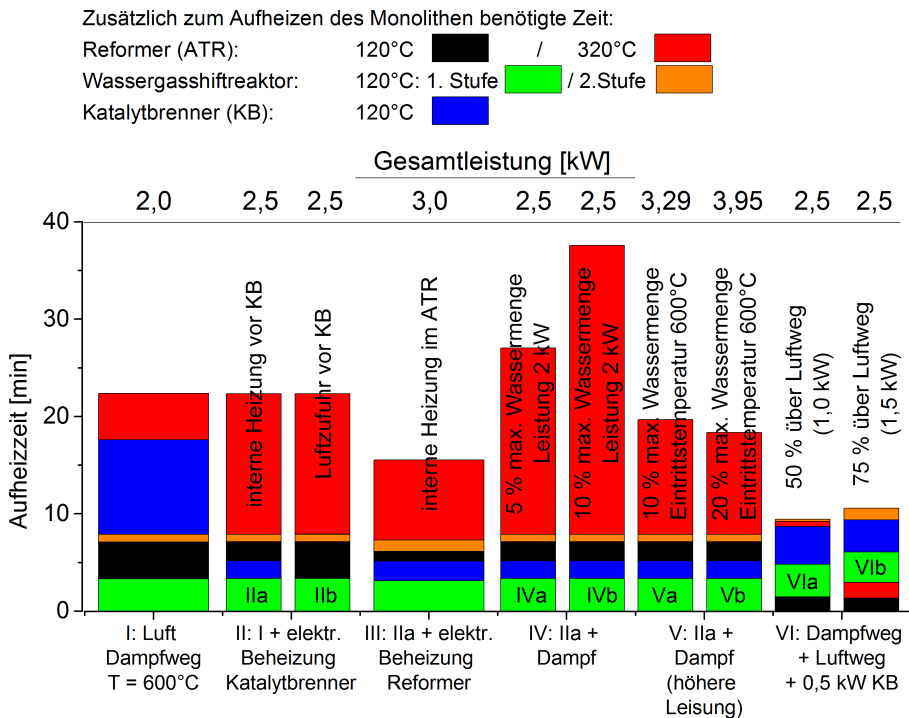


Abb. 5.18: Aufheizdauer der Kernkomponenten der Brenngaserzeugung

gen, muss die Zeit, bis der Reformer auf eine Temperatur von 320 °C aufgeheizt ist, deutlich reduziert werden. Hierfür wurde die interne Beheizung im Reformer und die Zugabe von Wasserdampf untersucht. Durch eine interne Beheizung im Reformer (Fall III) mit einer Leistung von 0,5 kW kann die Aufheizzeit von den 22 Minuten auf 16 Minuten reduziert werden. Bei der Aufheizung mit Wasserdampf treten verschiedene Phänomene auf. Diese Aufheizung kann erst durchgeführt werden, wenn die Temperaturen im System oberhalb des Taupunktes liegen. Die Aufheizzeit bis auf 120 °C bleibt unverändert. Eine Aufheizung mit der gleichen Leistung (Fall IV) führt bei der Zugabe von Wasser damit sogar zu einer Verzögerung des Aufheizvorgangs. Um das Wasser zu verdampfen, muss die Verdampfungsenthalpie des Wassers aufgebracht werden, die das System am Austritt des Katalytbrenners wieder verlässt. Die Zugabe von 10 % der maximalen Wassermenge führt zu einer Verlängerung der Aufheizzeit von 22 Minuten ohne Wasserzugabe auf 37,5 Minuten. Die Eintrittstemperatur sinkt bei diesen Fällen auf 487 °C (Fall IVa) beziehungsweise 412 °C (Fall IVb) ab. Für die gleiche Wassermenge und eine Eintrittstemperatur von 600 °C ergibt sich eine Aufheizzeit von 20 Minuten (Fall Va). Ausgehend von dem Basisfall steigt die benötigte Energiemenge für diesen Fall jedoch von 0,73 kWh auf 0,88 kWh und dieser Startvorgang ist energetisch nicht sinnvoll. Die parallele Aufheizung



über den Luft- und den Dampfweg des Reformers beschleunigt den Aufheizvorgang deutlich. Bei einer gleichmäßigen Aufteilung über beide Wege ist der Reformer nach 1,5 Minuten auf 120 °C aufgeheizt (Fall VIa). Die Aufheizung der nachfolgenden Komponenten bis zur Überschreitung des Taupunktes verzögert sich dadurch. Der Reformer erreicht jedoch in diesem Fall schon nach 9 Minuten die zur Zündung benötigten 320 °C und das System wäre nach 9,5 Minuten zündbereit. Dieser Aufheizvorgang ist der für das aktuelle System optimal. Weiterhin wurde eine Aufheizung mit der Zugabe von 75 % der auf 600 °C erwärmten Luft über den Luftweg untersucht (Fall VIb). Hieraus ergibt sich eine Aufheizzeit von 10,5 Minuten für den Aufheizvorgang. Der Reformer wäre jedoch in diesem Fall schon nach 3 Minuten zündbereit. Somit bleibt dieser Fall für ein System mit gewichtsoptimierten Komponenten interessant.

In Abbildung 5.19 sind der Basisfall (Fall I) und der Fall mit der gleichmäßigen Aufheizung über den Luft- und den Dampfweg (Fall VIa) gegenübergestellt. Nach 2 Minuten ist der Monolith im Basisfall noch auf Umgebungstemperatur. Die heiße Luft strömt durch den Dampfweg in den integrierten Wärmeübertrager und gibt einen Teil ihrer Enthalpie an den kalten Luftstrom im Wärmeübertrager ab. Dieser wird dann dem Wassergasshiftreaktor zugeleitet. Bei der parallelen Aufheizung ist bereits nach 2 Minuten der Taupunkt im Monolithen überschritten. Die Luft, die den Reformer verlässt, ist für den Fall der parallelen Aufheizung über einen langen Zeitraum kälter als im Basisfall. Dies führt wie bereits in Abbildung 5.18 gezeigt zu einer langsameren Aufheizung der nachgeschalteten Komponenten. Die parallele Zugabe der heißen Luft wird genutzt, um die Komponenten zeitgleich aufzuheizen.

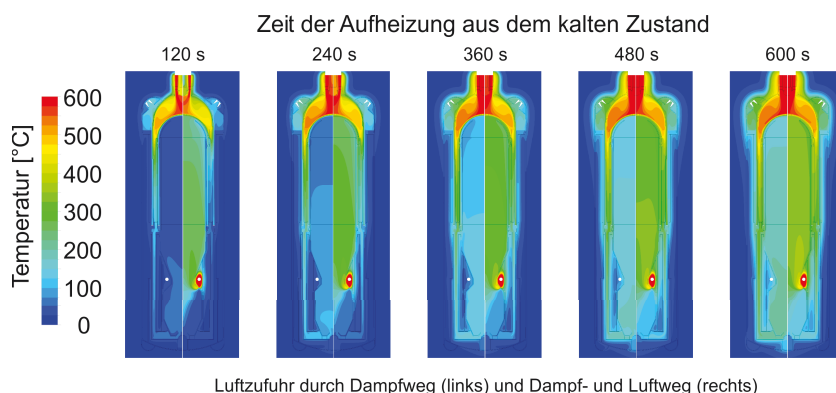


Abb. 5.19: Temperaturprofile während der Aufheizung des ATR 12 mit einer Leistung von 2 kW

### 5.3 Abschließende Auswertung der Startkonzepte

In diesem Kapitel wurden zwei Startkonzepte entwickelt. Zum Einen soll das Brennstoffzellensystem thermisch mit Hilfe eines Startbrenners gestartet werden. Zum Anderen wurde ein

Konzept vorgestellt, bei dem das Brenngaserzeugungssystem elektrisch gestartet wird und anschließend die Abwärme des Brenngaserzeugungssystems genutzt wird, um die Brennstoffzelle aufzuheizen. Für beide Konzepte wurde ein Systemlayout entwickelt und dieses wurde in einer dynamischen Systemsimulation umgesetzt, um die beiden Konzepte miteinander zu vergleichen. Zu diesem Zweck wurde ein dynamisches Systemmodell in MATLAB/Simulink erstellt und im Rahmen einer Masterarbeit [91] an das thermische Aufheizverhalten des Systems angepasst. Diese Simulationen zeigten, dass die Aufheizzeit des elektrischen Startvorgangs mit 30 Minuten deutlich kürzer ist, als der thermische Startvorgang mit 44 Minuten. Weiterhin ist die Regelung der Temperaturen beim elektrischen Startvorgang einfacher als beim thermischen Startvorgang. Die benötigte Energie ist andererseits bei dem thermischen Startvorgang geringer. Beide Konzepte scheinen prinzipiell für den Startvorgang des Systems geeignet zu sein. Zu diesem Zeitpunkt ist es nicht möglich aus diesen beiden Startvorgängen den am besten geeigneten Startvorgang auszuwählen. Im Rahmen der Hybridisierung und des Packings werden beide Startkonzepte weiter verfolgt und entwickelt.

Zusätzlich zu den dynamischen Systemsimulationen wurden transiente strömungsdynamische Simulationen durchgeführt, um orts aufgelöste Ergebnisse zu erhalten. Hierfür wurden in einem ersten Schritt verschiedene Modelle für poröse Körper untersucht und die Simulationsergebnisse mit experimentellen Temperaturverläufen verglichen. Das Ergebnis dieser Validierung war, dass nur das Zweizonenmodell, indem jeweils eine Energiegleichung für den Feststoff und die Gasphase des porösen Mediums gelöst werden, für die dynamische Aufheizsimulation geeignet ist. Weiterhin wurde eine Methodik für die dynamische Kopplung der einzelnen Reaktoren in zweidimensionalen Simulationen entwickelt. Durch diese Methodik konnten die Simulationen auf das gesamte Brenngaserzeugungssystem erweitert werden. Mit diesem Modell wurden Simulationen für verschiedene Reaktoren und Aufheizvorgänge durchgeführt. Ein Vergleich der beiden Reformer ATR 9.2 und ATR 12 zeigte, dass bei der Verwendung des Reformers ATR 12 die übrigen Systemkomponenten schneller aufgeheizt sind und dass der Reformer die limitierende Komponente ist. Bei der Verwendung des Reformers ATR 9.2 war der Reformer sehr schnell aufgeheizt und das System benötigte 5 Minuten länger für den Startvorgang. Die Verwendung des ATR 12 ist für die Startzeit des Systems vorteilhaft. Dieser wurde deshalb für eine weitere Optimierung des Startvorgangs verwendet. Der Basisfall der Optimierung war der Fall, bei dem der Reformer durch den Dampfweg aufgeheizt wurde. Die Aufheizzeit ergab sich bei einer Leistung von 2 kW für diesen Fall zu 22 Minuten. Es wurde gezeigt, dass sich eine zusätzliche Aufheizung des Katalytbrenners mit einer Leistung von 0,5 kW die Aufheizzeit des Katalytbrenners deutlich reduziert. Die Aufheizung des Reformers mit Wasserdampf führt bei der konstanten zugeführten Leistung zu einer Verzögerung der Aufheizung. Eine Erhöhung der Leistung bei der Aufheizung mit Wasserdampf verkürzt die Aufheizzeit geringfügig, wodurch jedoch auch der Energieverbrauch steigt. Es konnte weiterhin gezeigt werden, dass eine parallele Aufheizung über den Luft- und den Dampfweg des Reformers vorteilhaft ist. Die Aufheizzeit konnte von den 22 Minuten im Basisfall auf 9,5 Minuten bei einer gleichmäßigen Verteilung der Luft auf den Luft- und Dampfweg reduziert werden. Der Reformer ATR 12 ist neben der kurzen Aufheizzeit weiterhin vorteilhaft, da in den Wärmeübertrager eine elektrische Heizung integriert werden kann.

Die in diesem Kapitel gewonnen Erkenntnisse fließen in die Kapitel 6 (Hybridisierung) und 7 (Packaging) ein. Durch die Vernetzung dieser beiden Bereiche soll gewährleistet werden, dass ein gesamtsystemischer Entwurf für die Weiterentwicklung des Brennstoffzellensystems entsteht.

# 6 Erstellung und Optimierung des Hybridkonzeptes

Die Hybridisierung des Brennstoffzellensystems ist zwingend notwendig, um die Anforderungen einer mobilen Anwendung zu erfüllen. Die Batterie wird während des Startvorgangs des Brennstoffzellensystems zur Abdeckung des Leistungsbedarfs benötigt. Die Brennstoffzelle kann durch den Einsatz einer Batterie kleiner dimensioniert werden und muss nur die durchschnittlich benötigte Leistung erbringen. Durch eine Abfederung der Leistungsbedarfsänderungen erhöht sich weiterhin die Lebensdauer der Brennstoffzelle. In diesem Kapitel wird zuerst auf die analytische Herleitung des Hybridisierungsgrades eingegangen. Diese ist für generische Leistungsbedarfsprofile möglich. Weiterhin wird der Einsatz des dynamischen Hybridsystemmodells beschrieben. Mit diesem Modell wurden passive und aktive Hybridkonzepte untersucht und bewertet. Durch die Kopplung des Hybridsystemmodells mit dem thermischen Modell des Startvorgangs wurden die Wechselwirkungen zwischen der Hybridisierung und dem Startvorgang untersucht.

## 6.1 Analytische Herleitung des Hybridisierungsgrades

Von [94] wurde aus Gleichung 2.1 eine analytische Beziehung für den Hybridisierungsgrad (DOH) hergeleitet. Es wurde von periodischen Leistungsbedarfsprofilen, wie sie in Abbildung 6.1 zu sehen sind, ausgegangen. Das Leistungsbedarfsprofil besteht aus einem Bereich, indem für die Zeit  $t_{P,max}$  die maximale Leistung  $P_{max}$  abgerufen wird und einem Bereich mit der minimalen Leistung  $P_{min}$ , die für die Zeit  $t_{P,min}$  benötigt wird. Die Brennstoffzelle liefert die durchschnittlich benötigte Leistung des Systems.

$$P_{BZ} = \frac{P_{max}t_{P,max} + P_{min}t_{P,min}}{t_{P,max} + t_{P,min}} \quad (6.1)$$

Bei dieser Methode wird davon ausgegangen, dass die Brennstoffzelle direkt von Beginn an eine Leistung bereitstellen kann. Der benötigte Startvorgang des Systems wird bei dieser Betrachtung nicht berücksichtigt. Das Leistungsverhältnis  $F$  stellt das Verhältnis aus maximaler und minimaler Leistung und das Zeitverhältnis  $T$  das Verhältnis der entsprechenden Zeiten dar.

$$F = \frac{P_{max}}{P_{min}} \quad ; \quad T = \frac{t_{P,max}}{t_{P,min}} \quad (6.2)$$

Die Beziehung für den DOH in Abhängigkeit von  $F$  und  $T$  ergibt sich nach [94] entsprechend Gleichung 6.3:

$$DOH = \frac{P_{max} - P_{BZ}}{P_{max}} = \frac{F - 1}{F(T + 1)} \quad (6.3)$$

Die Batterie muss, beim Betrieb der Brennstoffzelle mit einer konstanten Leistung, die Differenz zwischen dem Leistungsbedarf und der Brennstoffzellenleistung abdecken können. Ein Leistungsverhältnis von 1 stellt einen Sonderfall dar, da es sich bei einem solchen System um ein reines Brennstoffzellensystem mit einem Hybridisierungsgrad von 0 handelt.

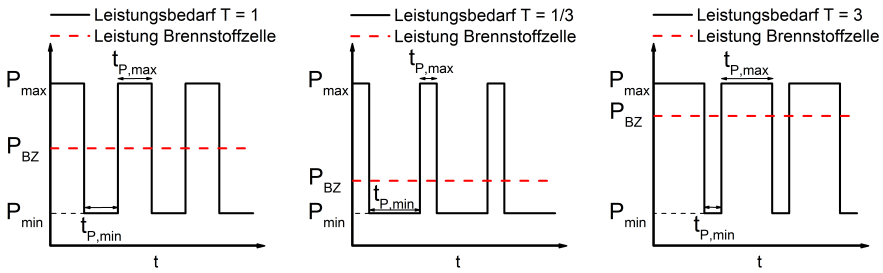


Abb. 6.1: Generische Leistungsbedarfsprofile mit variierenden Zeitverhältnissen

In Abb. 6.1 sind exemplarisch Leistungsbedarfsprofile mit verschiedenen Zeitverhältnissen  $T$  dargestellt. Bei einem Zeitverhältnis  $T$  von 1 deckt die Brennstoffzelle die mittlere Leistung ab und die Lade- und Entladeleistung der Batterie sind gleich groß. Bei abnehmendem Zeitverhältnis sinkt die Brennstoffzellenleistung ab, wodurch die benötigte Entladeleistung der Batterie ansteigt. Die Batterie wird über lange Zeiten bei einem geringen Strom geladen und bei einem hohen Strom kurzzeitig entladen. Dieses Verhältnis dreht sich bei Zeitverhältnissen größer 1 um, sodass die Batterie bei hohen Strömen geladen und bei niedrigen entladen wird. Aus Abbildung 6.1 ist ersichtlich, dass es Leistungsbedarfsprofile gibt, bei denen die maximale Entladeleistung größer ist als die Ladeleistung. Diese treten für kleine Zeitverhältnisse  $T$  auf. Für große Zeitverhältnisse hingegen ist die maximale Ladeleistung höher als die maximale Entladeleistung. Um diese Abhängigkeit zu quantifizieren wurde eine Ungleichung 6.4 aufgestellt.

$$\underbrace{P_{max} - P_{BZ}}_{\text{maximale Entladeleistung}} \geq \underbrace{P_{BZ} - P_{min}}_{\text{maximale Ladeleistung}} \quad (6.4)$$

Die maximale Entladeleistung soll nach dieser Ungleichung größer als oder gleich groß wie die maximale Ladeleistung sein. Durch Einsetzen der Gleichung 6.1 für die Brennstoffzellenleistung und den Verhältnissen aus Gleichung 6.2 kann die Ungleichung 6.4 in eine Beziehung für das Zeitverhältnis umgeformt werden.

$$T \leq 1 \quad (6.5)$$

Aus der Betrachtung von Abbildung 6.1 folgt, dass es eine Einteilung in einen durch die Ladung dominierten Bereich und einen durch die Entladung dominierten Bereich gibt. Die Einteilung dieser Bereiche konnte entsprechend den Ungleichungen 6.4 und 6.5 festgelegt werden. Gleichung 6.3 ist damit nur für Zeitverhältnisse kleiner gleich 1 gültig. In diesem Bereich ist die Entladeleistung ausschlaggebend für die Dimensionierung des Systems. Für ein Zeitverhältnis größer 1 lässt sich die Beziehung für den Hybridisierungsgrad ebenfalls herleiten zu Gleichung 6.6.

$$DOH = \frac{P_{BZ} - P_{min}}{P_{BZ} + (P_{BZ} - P_{min})} = \frac{FT - T}{2FT - T + 1} \quad (6.6)$$

Die Berechnung des Hybridisierungsgrades (DOH) mittels Gleichungen 6.3 bis 6.6 führt zu Abbildung 6.2. In diesem Diagramm sind mehrere Bereiche erkennbar. Bei einem Leistungsverhältnis  $F$  von 1 existiert nur ein Leistungsniveau, welches vollständig von der Brennstoffzelle versorgt werden kann. Mit steigendem Leistungsverhältnis und damit mit zunehmender Spreizung der Leistungsniveaus steigt der Bedarf an zusätzlicher Leistung durch die Batterie. Der niedrigste DOH für ein gegebenes  $F$  liegt bei einem Zeitverhältnis von 1, was einer Ladung und Entladung mit gleicher Leistung entspricht.

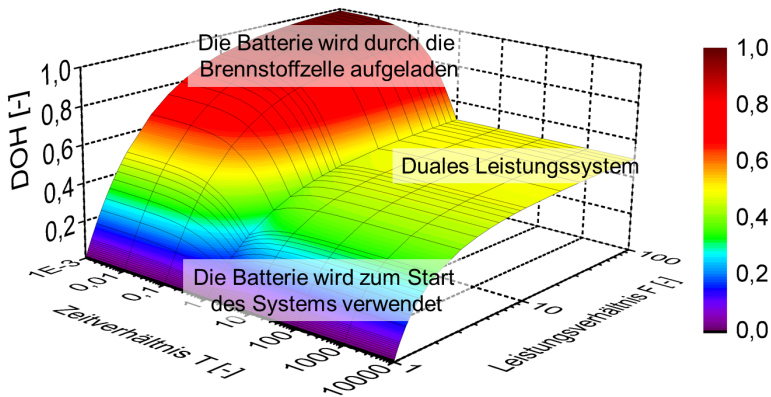


Abb. 6.2: Hybridisierungsgrad für generische Leistungsbedarfsprofile

Für sehr kleine Zeitverhältnisse  $T$  geht die mittlere Leistung asymptotisch in die minimale Leistung über. Die Batterie muss die Leistungsspitzen abdecken, was dazu führen kann, dass die Leistung der Batterie um Größenordnungen größer sein muss als die Leistung der Brennstoffzelle. Für große Leistungsverhältnisse nähert sich der Hybridisierungsgrad dem Wert 1.

Für große Zeitverhältnisse liefert die Brennstoffzelle näherungsweise die maximal benötigte Leistung. Die Batterie wird in diesem Fall dazu benötigt, um bei kleinem Leistungsbedarf die überschüssige Leistung aufnehmen zu können. Bei unendlich großen Leistungsverhältnissen sind Brennstoffzellen- und Batterieleistung identisch, was zu einem Hybridisierungsgrad von 0,5 führt.

Mit dieser Methode kann für generische Leistungsbedarfsprofile der Hybridisierungsgrad bestimmt werden. Dies geschieht unter der Annahme, dass die Brennstoffzelle mit einer konstanten Leistung betrieben wird. Der Betrieb der Brennstoffzelle mit einer konstanten Leistung führt je nach Leistungsbedarfsprofil zu einer hohen Kapazität der Batterie. Die für ein Leistungsbedarfsprofil benötigte Kapazität der Batterie wird durch diese Berechnung nicht abgedeckt werden. Weiterhin kann mit dieser Methode für beliebige Leistungsbedarfsprofile nur eine erste Abschätzung getroffen werden. Um alle Einflüsse der Hybridisierung auf den dynamischen Systembetrieb zu untersuchen, wurde deshalb ein dynamisches Hybridsystemmodell erstellt. Dieses Modell und die betrachteten Leistungsbedarfsprofile werden im Folgenden vorgestellt.

## 6.2 Dynamische Simulation des Hybridsystems

Das für den Startvorgang verwendete dynamische Systemmodell wurde um die elektrischen Komponenten erweitert. Neben dem thermischen Brennstoffzellenmodell wurde ein elektrisches Modell erstellt. Weiterhin wurden Modelle für die Batterie, den Spannungswandler und die Verbraucher erstellt. Das Gesamtmodell ist wie bereits in Kapitel 4.2 beschrieben modular aufgebaut. Durch diesen modularen Aufbau können die verschiedenen Hybridverschaltungen miteinander verglichen werden. Der Aufbau des Gesamtmodells wurde bereits in Abbildung 4.4 vorgestellt. Die Ergebnisse der Hybridsimulation werden stark durch das Leistungsbedarfsprofil der Anwendung beeinflusst. Die Auslegung und der Betrieb des Hybridsystems muss für jede Anwendung optimiert werden. Im Folgenden werden Leistungsbedarfsprofile für die Anwendung der Bordstromversorgung in einem LKW vorgestellt.

Im Rahmen der Zusammenarbeit mit dem Institut für Kraftfahrzeuge der RWTH Aachen und dem IEK-3 im Projekt "Elektrochemische Speicher im System - Sicherheit und Integration" wurde vom Institut für Kraftfahrzeuge ein Leistungsbedarfsprofil für eine LKW-Kabine erstellt. Dieses ist in Abbildung 6.3 für den Sommerbetrieb dargestellt. Der Leistungsbedarf der einzelnen Anwendungen wurde vermessen und die Fahrer wurden nach der Häufigkeit und Dauer des Einsatzes befragt. Zur besseren Darstellung wurden die einzelnen Apparate in die fünf Gruppen: Klimatisierung, Haushaltsgeräte, Unterhaltung, Beleuchtung und Sonstiges gruppiert [95]. Dieses Leistungsbedarfsprofil zeichnet sich durch zwei Leistungsniveaus aus. Während der Ruhe- und Standzeiten läuft die Klimaanlage mit einer Leistung von 1 kW. Weiterhin werden Haushalts- und Unterhaltungsgeräte verwendet. Die Haushaltsgeräte sind für kurze Peaks beim Leistungsbedarf verantwortlich, wobei die Unterhaltungselektronik meistens über einen längeren Zeitraum verwendet wird. Die hohen Leistungsbedarfe fallen bei diesem

Profil während der Fahrt an. Die Klimaanlage des Motors hat einen Leistungsbedarf von 7 kW. Bei der Verwendung des Leistungsbedarfsprofils wird davon ausgegangen, dass die benötigte Leistung für diese Klimaanlage weiterhin durch den Verbrennungsmotor bereitgestellt wird. Das selbe gilt für den Leistungsbedarf der anderen Komponenten während der Fahrt. Von Grube et al. [96] wurde gezeigt, dass sich bei der Stromproduktion während der Fahrt mit 45 % sehr gute Differenzwirkungsgrade ergeben. Bei diesen Differenzwirkungsgraden wird die zusätzlich zur Stromproduktion benötigte Energie zur Ermittlung des Wirkungsgrades verwendet. Die APU wird nur zur Versorgung der Pausenzeiten verwendet.

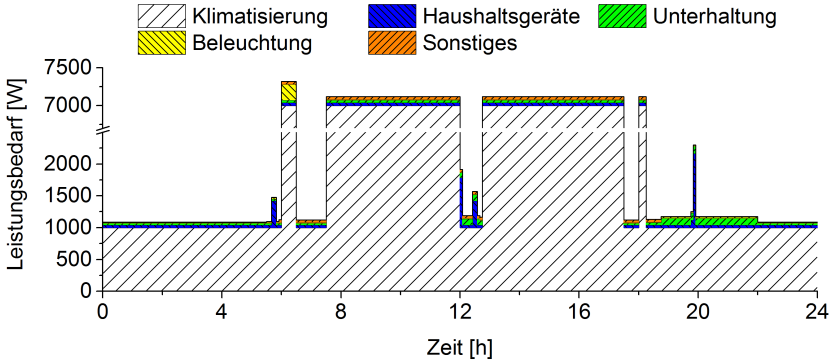


Abb. 6.3: Leistungsbedarfsprofil einer LKW-Kabine im Sommer [95]

Unter dieser Annahme ergibt sich für eine Betriebszeit von 14,25 Stunden eine durchschnittlich benötigte Leistung von 1120 W. Für einen Zyklus wird eine Energiemenge von 16 kWh benötigt. Unter der Annahme, dass die Brennstoffzelle direkt startbereit ist, kann die Batterie im Vergleich zu einem reinen Batteriesystem um den Faktor 58 kleiner dimensioniert werden. Für diese Abschätzung wurde zuerst die benötigte Energiemenge ermittelt. Aus der Energiemenge und der Dauer des Profils wurde die durchschnittliche Leistung errechnet. Weiterhin wurde das Integral aus der Differenz zwischen dem Leistungsbedarf und der durchschnittlich benötigten Leistung bestimmt. Aus den Extremwerten des Integrals lässt sich die in der Batterie zu speichernde Energie berechnen. Der Faktor zwischen der Batteriegröße im Hybridsystem und der Batteriegröße des reinen Batteriesystems lässt sich nach Gleichung 6.7 berechnen.

$$\frac{E_{\text{Batterie im Hybridsystem}}}{E_{\text{Batterie im Batteriesystem}}} = \frac{\max \left[ \int_t (P_{\text{Bedarf}} - P_{\text{BZ}}) dt \right] - \min \left[ \int_t (P_{\text{Bedarf}} - P_{\text{BZ}}) dt \right]}{\int_{t_0}^{t_{\text{Ende}}} P_{\text{Bedarf}} dt} \quad (6.7)$$

Bei dieser Gleichung wurde der benötigte Start der Brennstoffzelle nicht berücksichtigt. Unter der Annahme, dass die Brennstoffzelle ausschließlich für Betriebszeiten, die länger als 2 Stunden



andauern, verwendet wird, reduziert sich dieser Faktor für einen konstanten Brennstoffzellenbetrieb auf etwa 6.

Das Leistungsbedarfsprofil in Abbildung 6.4 basiert auf einer in den USA im Jahr 2003 durchgeführten Umfrage [5]. Die benötigte Leistung der einzelnen Geräte wurde vermessen und die Fahrer wurden nach der verwendeten Zeit dieser Geräte gefragt. Aus diesen Daten wurde von Lutsey [97] das Leistungsbedarfsprofil in Abbildung 6.4 erstellt. Dieses Profil repräsentiert die nach Lutsey et al. [5] repräsentativen 5 Stunden Pause des Fahrers. Die hohen Leistungsbedarfe stehen auch hier für eine Beheizung oder Klimatisierung der Kabine. Diese sind von den anderen elektrischen Geräten überlagert. Für dieses Leistungsbedarfsprofil ergibt sich eine durchschnittliche Leistung von 1870 W und eine benötigte Energie von 9,4 kWh. Der minimal benötigte Hybridisierungsgrad für einen konstanten Brennstoffzellenbetrieb lässt sich zu 0,57 abschätzen. Für diesen Fall ergibt sich ein Faktor von 6 zwischen einem reinen Batteriesystem und dem Hybridsystem für die Batteriegröße. Von Lutsey [97] wurden zwei weitere Leistungsbedarfsprofile angegeben, die den Sommer- und den Winterbetrieb repräsentieren. Bei beiden Profilen steigt der minimale sowie der durchschnittliche Leistungsbedarf deutlich an, da von einer durchgehenden Klimatisierung beziehungsweise Heizung ausgegangen wurde. Die durchschnittlich benötigte Leistung steigt auf 3120 W für den Sommer- und 2320 W für den Winterbetrieb. Aus diesen Profilen ergeben sich für den Hybridisierungsgrad Werte von 0,4 für den Sommer- und 0,47 für den Winterbetrieb. Die Unterschiede für die Batteriedimensionierung fallen für diese Profile mit dem Faktor 46 für den Sommer- und 35 für den Winterbetrieb sehr hoch aus.

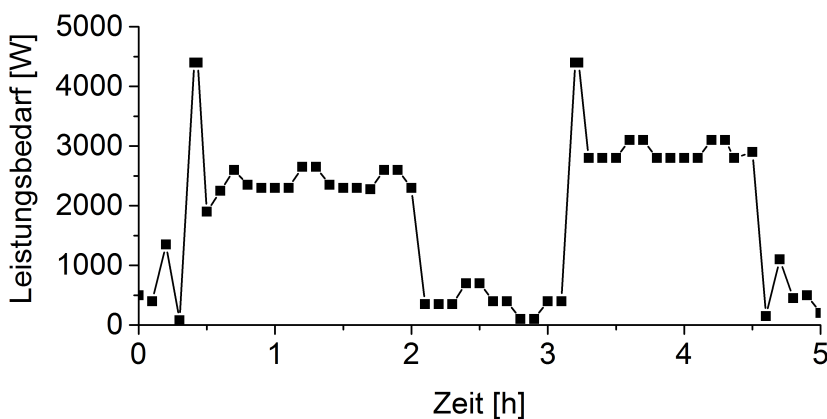


Abb. 6.4: Leistungsbedarfsprofil einer LKW-Kabine nach Lutsey [97]

Ein von Sorrentino und Pianese [98] erstelltes Leistungsbedarfsprofil ist in Abbildung 6.5 dargestellt. Dieses Profil basiert auf typischen Mittel- und Maximalwerten für eine LKW-APU.

Der zeitliche Verlauf des Profils wurde aus Zufallswerten erzeugt. Die durchschnittliche Leistung dieses Profils ergibt sich zu 2140 W mit einer benötigten Leistung von 4,3 kWh. Der Hybridisierungsgrad für dieses Profil ergibt sich zu 0,64 und die Batterie kann für diesen Fall um den Faktor 11 kleiner dimensioniert werden.

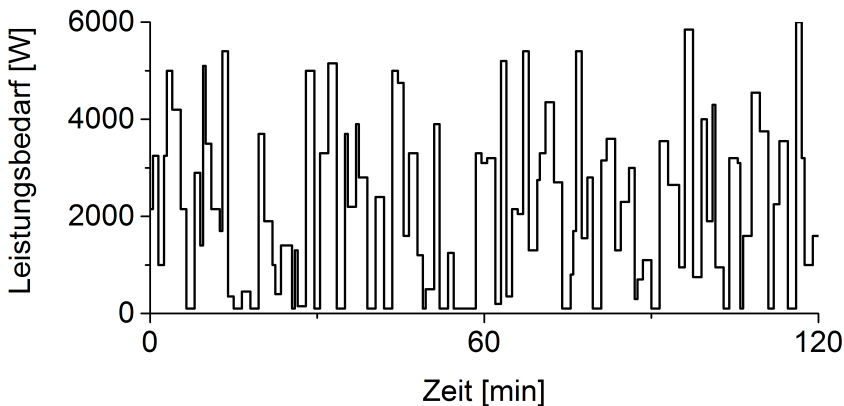


Abb. 6.5: Leistungsbedarfsprofil einer LKW-Kabine nach Sorrentino und Pianese [98]

Diese Leistungsbedarfsprofile werden im Folgenden als Randbedingungen für die Simulation verwendet. Anhand der dynamischen Simulationen soll dann die Hybridsystemverschaltung, die Betriebsweise des Hybridsystems und die Dimensionierung der Batterie festgelegt werden.

### 6.2.1 Direkte Hybridverschaltung

Das Grundkonzept der direkten Hybridverschaltung wurde bereits in Kapitel 3.2.1.1 vorgestellt. Bei dieser Verschaltungsart sind die Spannungsniveaus der Brennstoffzelle und der Batterie direkt gekoppelt. Die Brennstoffzellen- und die Batteriespannung müssen passend zueinander dimensioniert werden. Die Brennstoffzelle muss weiterhin auf die durchschnittlich benötigte Leistung ausgelegt werden. Bei dem Konzept der Verschaltung mittels Dioden deckt die Brennstoffzelle bei kleinen benötigten Leistungen den Leistungsbedarf alleine ab. Der Brenngas-Nutzungsgrad würde bei einem System basierend auf der Reformierung bei kleinen Leistungen deutlich zurückgehen. Dies ist dadurch begründet, dass die Brennstoffzelle jederzeit in der Lage sein muss, eine höhere Leistung bereitzustellen. Das Reformat wird nicht gespeichert, sondern direkt im katalytischen Brenner verbrannt. Weiterhin würden bei diesem Konzept hohe dynamische Anforderungen an die Brennstoffzelle gestellt. Im Folgenden wird das Konzept näher betrachtet, bei dem die beiden Komponenten mittels eines Schalters verschaltet sind. Die Brennstoffzelle kann mit der gewünschten Leistung auf die offene Zellspannung der Batterie dimensioniert werden. Wenn das System ausgeschaltet wird, kann die Brennstoffzelle von

der Batterie entkoppelt werden. Die Auslegung der Brennstoffzelle für dieses Konzept ist exemplarisch in Abbildung 6.6 dargestellt. Als Batterie wurde, wie bei den folgenden Simulationen, eine Hochleistungsbatterie der Firma SAFT mit der Kennzeichnung VL7P verwendet.

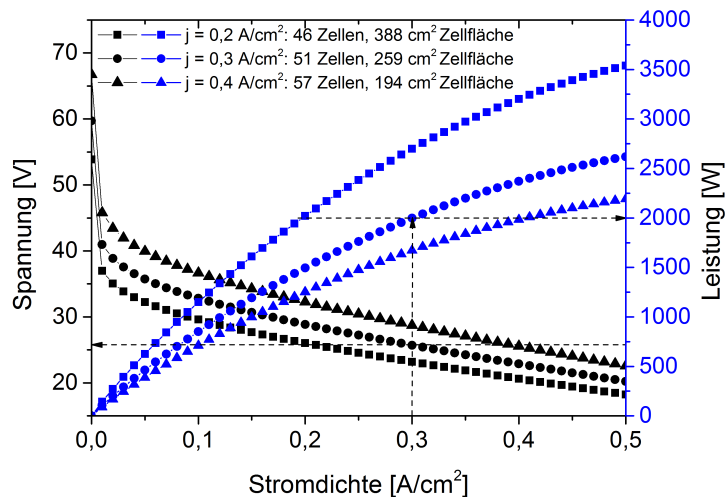


Abb. 6.6: Direkte Hybridverschaltung: Auslegung der Brennstoffzelle auf eine Leistung von 2 kW

Eine VL7P-Batteriezelle besitzt eine Nennspannung von 3,6 V und eine Nennkapazität von 7 Ah [99]. Diese Lithium-Ionen-Batterie wurde im Rahmen der Zusammenarbeit mit dem Institut für Kraftfahrzeuge der RWTH Aachen und dem IEK-3 im Projekt "Elektrochemische Speicher im System - Sicherheit und Integration" vom Institut für Kraftfahrzeuge hinsichtlich der offenen Zellspannung und des Innenwiderstandes charakterisiert. Die Ergebnisse dieser Messung und eine daraus berechnete Wirkungsgradkennlinie der Batterie sind im Anhang dargestellt. In der Anwendung der Bordstromversorgung wird eine höhere Spannung von etwa 24 V benötigt. Der Batteriepack besteht für diesen Einsatzfall aus 7 Einzelzellen in Serie und erreicht eine Nennspannung von 25,2 V. Die offene Zellspannung ergibt sich aus den gemessenen Werten für die betrachtete Batterie bei einem Ladezustand von 60 % zu 25,77 V. Die Brennstoffzelle wird bei dieser Spannung auf eine Leistung von 2 kW ausgelegt. Für diese Leistung und drei verschiedene Stromdichten wurde die Anzahl der Zellen in Serie und die benötigte Zellfläche bestimmt. Die Anzahl der Zellen wurde aus der benötigten Spannung und der Spannung einer Zelle bei der gegebenen Stromdichte ermittelt. Die Zellfläche wirkt sich auf den bereitgestellten Strom und damit auf die Leistung aus. Um die Leistung des Systems bei gleichbleibendem Wirkungsgrad anzupassen, muss die Zellfläche verändert werden. Eine Erhöhung der Stromdichte am Auslegungspunkt führt zu einer Reduzierung der Zellfläche und einer Erhöhung der Zellanzahl. Die Gesamtfläche der Brennstoffzelle sinkt, da die

Zellanzahl langsamer ansteigt, als die Zellfläche sinkt. Die Stromspannungskennlinie und die Leistungskennlinie sind in Abbildung 6.6 für drei Stromdichten gezeigt. Als Kompromiss aus Brennstoffzellengröße und Wirkungsgrad wurde beispielhaft eine Stromdichte von  $0,3 \text{ A/cm}^2$  gewählt.

Die Leistungsaufteilung zwischen der Batterie und der Brennstoffzelle ist für zwei verschiedene Batteriegrößen in Abbildung 6.7 dargestellt. Bei dieser Betrachtung wurde einmal der Fall mit 7 Batteriezellen in Serie und einmal der Fall mit 10 parallelen Strängen mit jeweils 7 Zellen in Serie betrachtet. In diesem Diagramm sind die Leistungen über dem Leistungsbedarf dargestellt. Der dargestellte Fall wurde für einen Ladezustand der Batterie von 60 % berechnet. Die Brennstoffzelle wurde bei dieser Berechnung so dimensioniert, dass sich bei einer Spannung, die der offenen Zellspannung der Batterie entspricht, eine Leistung von 2000 W einstellt. Der Leistungsbedarf von 2 kW wird vollständig durch die Brennstoffzelle abgedeckt. Mit abnehmendem Leistungsbedarf sinkt die Brennstoffzellenleistung bis auf 1771 W bei 0 W Leistungsbedarf ab. Die Batterie deckt die Differenz zwischen dem Leistungsbedarf und der von der Brennstoffzelle bereitgestellten Leistung, sodass sie mit abnehmendem Leistungsbedarf zunehmend geladen wird. Bei einem höheren Leistungsbedarf steigt die Brennstoffzellenleistung weiter an und erreicht bei einem Leistungsbedarf von 5000 W eine Leistung von 2339 W. Die Differenz in der Leistung der Brennstoffzelle beträgt in dem angegebenen Bereich 568 W. Im zweiten Fall wurden 10 Batteriestränge mit jeweils 7 Zellen in Serie parallel geschaltet. Durch die Parallelschaltung der Zellen sinkt der Gesamtwiderstand des Batteriepacks. Durch diesen Effekt reduziert sich die Leistungsänderung der Brennstoffzelle. Dieser Fall ist in Abbildung 6.7 rechts dargestellt. In diesem Fall ändert sich die Brennstoffzellenleistung von 1970 W bei keinem Leistungsbedarf bis auf 2034 W bei einem Leistungsbedarf von 5 kW. Diese Betrachtung zeigt eine Momentaufnahme bei einem Ladezustand von 60 %. Der Ladezustand ändert sich während des Betriebs jedoch entsprechend der gespeicherten oder entnommenen Ladungsmenge.

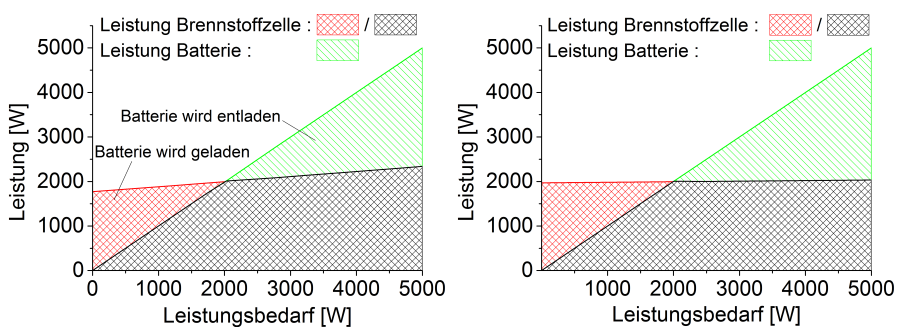


Abb. 6.7: Direkter Hybrid: Leistungsaufteilung zwischen Batterie und Brennstoffzelle: Vergleich zwischen einer (links) und zehn parallelen Batteriezellen (rechts)

Dieses Konzept wurde auf ein Leistungsbedarfsprofil aus der Literatur [97] entsprechend Abbildung 6.4 angewendet. Die dynamische Leistungsaufteilung wurde mit dem entwickelten Systemmodell für diesen Fall bestimmt. Die Leistungsaufteilung ist in Abbildung 6.8 für eine Batteriekonfiguration mit 20 parallelen Strängen gezeigt. Bei einem niedrigen Leistungsbedarf wird die Batterie geladen und bei einem hohen Leistungsbedarf entladen. Nach den Leistungsverteilungsverläufen aus Abbildung 6.7 dürfte sich die Brennstoffzellenleistung bei dieser Batteriedimensionierung kaum ändern. Durch die Änderung des Ladezustands ändert sich jedoch auch die offene Zellspannung der Batterie. Durch diese Spannungsänderung der Batterie ändert sich auch die Leistung der Brennstoffzelle.

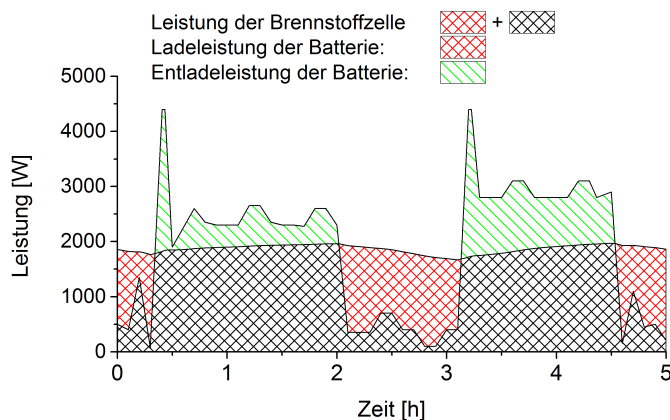


Abb. 6.8: Direkt Hybrid: Leistungsbereitstellung für die Anwendung als LKW-APU (20 Zellen parallel)

Der Ladezustand der Batterie und die von der Brennstoffzelle bereitgestellte Leistung sind für dieses Profil und eine Variation der Zellanzahl in Abbildung 6.9 gezeigt. Die minimale Anzahl von 20 parallelen Zellen wurde aufgrund der Ladezustandsgrenzen gewählt. Durch eine Erhöhung der Batteriekapazität sinkt die Entladetiefe der Batterie. Gleichzeitig sinkt dadurch die Differenz in der Batteriespannung und dadurch auch die Schwankung in der Brennstoffzellenleistung. Für diesen Fall variiert die Brennstoffzellenleistung zwischen 1667 W und 1968 W bei einer mittleren benötigten Leistung von 1865 W.

Das Konzept der direkten Hybridverschaltung ist prinzipiell für den Anwendungsfall der Bordstromversorgung geeignet. Bei der Verschaltung der Komponenten mittels eines Schalters variiert die Brennstoffzellenleistung nur gering. Die Variation der Brennstoffzellenspannung lässt sich über die Dimensionierung der Batterie anpassen. Durch die geringe Änderung der Brennstoffzellenleistung ist bei diesem Konzept jedoch eine hohe Batteriekapazität notwendig. Die erzeugte Reformatmenge sollte zur Erreichung eines hohen Wirkungsgrades an die Leistung

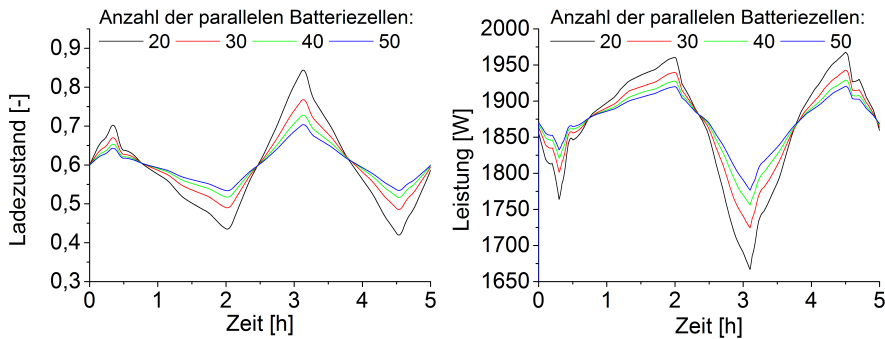


Abb. 6.9: Direkter Hybrid: Ladezustand der Batterie (links) und Leistung der Brennstoffzelle (rechts) in Abhängigkeit der Dimensionierung der Batterie

der Brennstoffzelle angepasst werden. Dies ist bei diesem Konzept durch eine Steuerung basierend auf der Spannung oder des Ladezustands der Batterie möglich. Im Folgenden wird die aktive Hybridverschaltung näher betrachtet. Bei diesem Konzept ist es möglich die Brennstoffzelle unabhängig von der Batterie zu regeln und die Batterie dadurch kleiner zu dimensionieren.

### 6.2.2 Aktive Hybridverschaltung

In diesem Abschnitt wird die aktive Hybridverschaltung untersucht. Wie bereits in Kapitel 3.2.1.2 erwähnt, gibt es verschiedene Varianten zur aktiven Hybridverschaltung. Diese unterscheiden sich hinsichtlich der Anzahl der eingesetzten Spannungswandler und der Verbindung der einzelnen Komponenten. Im Folgenden wird das Konzept, bei dem die Brennstoffzelle mit dem Spannungswandler in Serie geschaltet ist, genauer betrachtet. Bei diesem Konzept ist die Brennstoffzelle hinsichtlich ihrer Spannungslage von den anderen Komponenten entkoppelt. Sie kann unabhängig von den anderen Komponenten dimensioniert und betrieben werden. Die Batterie ist hingegen parallel mit dem Verbraucher verbunden. Die Spannungslage der Batterie und des Verbrauchers wird durch das Leistungsgleichgewicht erzwungen. Die Batterie deckt bei diesem Konzept die Leistungsdifferenz zwischen der benötigten und der von der Brennstoffzelle zur Verfügung gestellten Leistung. Die Batteriespannung stellt sich entsprechend dieser Leistungsdifferenz ein. Die Vorteile dieses Konzeptes sind, dass die Spannung der Batterie sich aufgrund des geringen Innenwiderstandes nur wenig mit der Leistung ändert und dass die Brennstoffzelle spannungsmäßig entkoppelt ist.

Mit dieser Verschaltungsvariante wurden verschiedene Betriebsstrategien untersucht. Für die durchgeführten Simulationen wurde zuerst das Leistungsbedarfsprofil entsprechend Abbildung 6.4 gewählt. Da die Spannung der Brennstoffzelle von der Spannung des Verbrauchers entkoppelt ist, erlaubt diese aktive Verschaltung den Betrieb der Brennstoffzelle mit einer konstanten Leistung. Weiterhin kann die Leistung der Brennstoffzelle jedoch auch variiert werden. Der

Verlauf der Ströme im System ist in Abbildung 6.10 für zwei verschiedene Betriebsstrategien dargestellt. Die Brennstoffzelle wurde zum Einen mit einer konstanten Leistung betrieben (Abb. 6.10 links) und zum Anderen mit zwei verschiedenen konstanten Leistungsniveaus (Abb. 6.10 rechts).

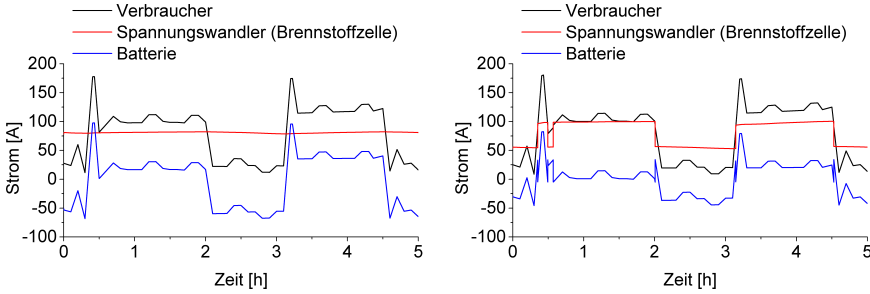


Abb. 6.10: Betriebsstrategie BS 1 mit einer konstanten Brennstoffzellenleistung (links) und BS 2 mit zwei Leistungsniveaus (rechts)

Dargestellt sind die Ströme auf der Niederspannungsseite des Gleichstromwandlers. Der Strom des Verbrauchers ist durch die schwarze Linie repräsentiert. Er wird aus dem Leistungsbedarf, entsprechend des Profils aus Abbildung 6.4, dividiert durch die Spannung der Batterie berechnet. Der Verlauf der Kurve ist dadurch sehr ähnlich zum Verlauf des Leistungsbedarfsprofils. Die Brennstoffzelle wird wie bereits erwähnt mit einer konstanten Leistung und mit einem konstanten Strom betrieben. Die Stromstärke auf der Niederspannungsseite des Gleichstromwandlers ändert sich jedoch durch die Änderung in der Spannung der Batterie. Die blaue Linie repräsentiert den Strom der Batterie. Dieser nimmt als einziger sowohl positive als auch negative Werte an. Ein positiver Wert bedeutet, dass die Batterie einen Strom und damit eine Leistung bereitstellt. Bei einem negativen Wert nimmt die Batterie einen Strom auf und wird geladen. Die Leistung der Brennstoffzelle wurde iterativ so eingestellt, dass sich am Ende des Zyklus der gleiche Ladezustand wie zu Beginn ergibt. Das Integral des Batteriestroms ergibt sich so zu 0. Als Brennstoffzelle wurde hier die aktuell im System verbaute Konfiguration mit 70 Zellen und einer Zellfläche von  $320 \text{ cm}^2$  verwendet. Für die Simulationen wurde weiterhin ein Batteriepack mit 15 parallelen und jeweils 7 seriellen Zellen und einem anfänglichen Ladezustand von 60 % angenommen. Dieser Batteriepack basiert auf den VL7P Einzelzellen der Firma SAFT. Für den Fall der konstanten Brennstoffzellenleistung von 2194 W ergibt sich unter diesen Randbedingungen ein Wirkungsgrad der Brennstoffzelle von 30,9 % und ein Wirkungsgrad des Systems von 29,3 %. Die Wirkungsgrade der Brennstoffzelle und der Batterie wurden nach den Gleichungen 6.8 und 6.9 ausgerechnet.

$$\eta_{\text{Brennstoffzelle}} = \frac{\int_{t=0}^{t_{\text{Ende}}} (P_{\text{Brennstoffzelle}} - P_{\text{Peripherie}}) dt}{\int_{t=0}^{t_{\text{Ende}}} \dot{m}_{\text{Kraftstoff}} \cdot H_U dt} \quad (6.8)$$

Bei der Berechnung des Brennstoffzellenwirkungsgrades wird die von der Brennstoffzelle bereitgestellte Leistung, abzüglich aller Verbraucher auf die durch den Kraftstoff zugeführte Energie bezogen. Für diese Berechnung wurde der untere Heizwert des Kraftstoffs verwendet. Der Hybridsystemwirkungsgrad wird aus der Leistungsanforderung des Systems bestimmt. Beide Gleichungen gelten nur für den Fall, dass der Ladezustand der Batterie zu Beginn und Ende der Simulation identisch sind. Um diese Randbedingung zu gewährleisten wird die Brennstoffzellenleistung iterativ angepasst.

$$\eta_{\text{Hybridsystem}} = \frac{\int_{t=0}^{t_{\text{Ende}}} P_{\text{Leistungsbedarf}} dt}{\int_{t=0}^{t_{\text{Ende}}} \dot{m}_{\text{Kraftstoff}} \cdot H_U dt} \quad (6.9)$$

Der Fall mit zwei Leistungsniveaus ist in Abbildung 6.10 rechts gezeigt. Bei dieser Simulation wurde die Brennstoffzellenleistung bei einem Leistungsbedarf oberhalb von 2150 W zu 2622 W und unterhalb dieser Schwelle zu 1500 W eingestellt. Der Stromverlauf des Spannungswandlers passt sich durch diese beiden Leistungsniveaus weiter an den Verlauf des Leistungsbedarfprofils an. Zwei weitere Betriebsstrategien sind in Abbildung 6.11 gezeigt.

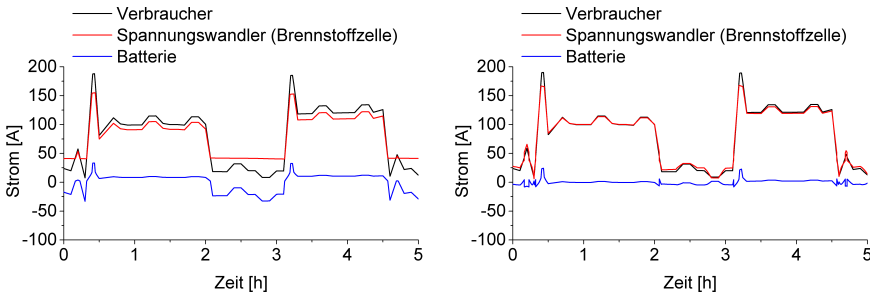


Abb. 6.11: Betriebsstrategie BS 3 mit einer dynamischen Anpassung des Brenngaserzeugungssystems (links) und BS 4 mit einer zusätzlichen Reduzierung des Wasserstoffnutzungsgrades im tiefen Teillastbereich (rechts)

Bei der Betriebsstrategie 3 wurde das Brenngaserzeugungssystem dynamisch dem Leistungsbedarf nachgefahren. Als tiefste Grenze wurde bei einem 5 kW System von 20 % Teillast ausgegangen. Während vom Verbraucher ein hoher Leistungsbedarf anfällt, wird von dem Brennstoffzellensystem eine geringere Leistung geliefert. Die Batterie wird entladen. In den Zeiten in denen ein niedriger Leistungsbedarf anfällt, produziert die Brennstoffzelle die minimale Leistung von 1 kW. Die Batterie wird wieder aufgeladen, sodass am Ende des Zyklus weiterhin ein Ladezustand von 60 % erreicht wird. Bei der Betriebsstrategie 4 wird die Brennstoffzelle noch weiter im Teillastbereich (<20 % Leistung) betrieben. Das Brenngaserzeugungssystem fährt wie bei Betriebsstrategie 3 dynamisch den Leistungsbedarf nach. Bei einem Leistungsbedarf



unterhalb von 1 kW wird die Brennstoffzelle so geregelt, dass sie den Leistungsbedarf deckt. Dies führt zu einem Absinken des Wasserstoffnutzungsgrades.

Der Verlauf des Ladezustandes ist für diese Konzepte in Abbildung 6.12 dargestellt. Bei der Betriebsstrategie mit einer konstanten Brennstoffzellenleistung (BS 1) variiert der Ladezustand zwischen 36,6 % und 93,7 %, während er für die Betriebsstrategie mit zwei Leistungsniveaus (BS 2) zwischen 48,2 % und 84,2 % variiert. Durch ein dynamisches Nachfahren des Leistungsprofils kann die Variation des Ladezustands auf den Bereich zwischen 48,4 % und 69,5 % reduziert werden (BS 3). Die zusätzliche Absenkung des Wasserstoffnutzungsgrades im tiefen Teillastbereich (BS 4) führt zu einem Betrieb der Batterie bei einem Ladezustand zwischen 59 % und 63 %. Ausgehend von Betriebsstrategie 1 nimmt bei den folgenden Betriebsstrategien die benötigte Kapazität der Batterie ab. Durch die reduzierte Entladetiefe der Betriebsstrategien 2 bis 4 kann in diesen Fällen die Batteriegröße reduziert werden. Bei Betriebsstrategie 2 werden anstatt der 15 parallelen Zellen nur 11, bei BS 3 6 und bei BS 4 2 parallele Batteriestränge benötigt. Für Betriebsstrategie 2 kann die Batterie um 27 %, für BS 3 um 60 % und BS 4 um 87 % kleiner dimensioniert werden als in Betriebsstrategie 1.

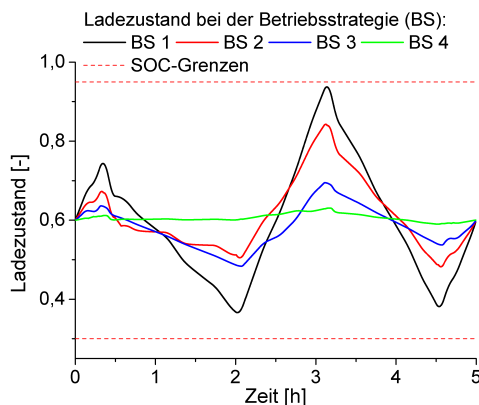


Abb. 6.12: Verlauf des Ladezustands für die verwendeten Betriebsstrategien

Der Wirkungsgrad der Brennstoffzelle und des Hybridsystems ist in Abbildung 6.13 dargestellt. Ausgehend von Betriebsstrategie 1 sinkt sowohl der Wirkungsgrad der Brennstoffzelle, als auch des Systems immer weiter ab. Für Betriebsstrategie 1 beträgt der Hybridsystemwirkungsgrad basierend auf einer 5 kW Brennstoffzelle, wie sie im System verbaut ist, 29,3 %. Der Wirkungsgrad sinkt durch den Betrieb der Brennstoffzelle in einem weiteren Leistungsbereich auf 28,9 % bei BS 2 und 28,1 % bei BS 3 ab. Durch eine zusätzliche Reduzierung des Wasserstoffnutzungsgrades im Teillastbereich sinkt der Wirkungsgrad für BS 4 auf 26,1 % ab.

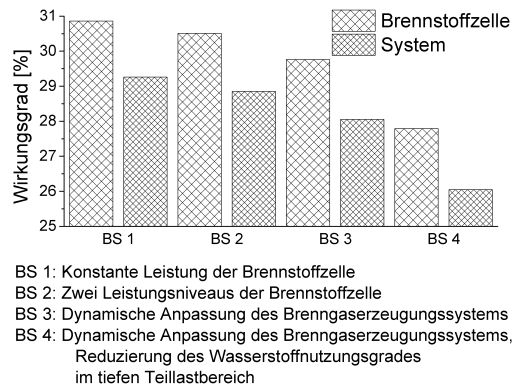


Abb. 6.13: Wirkungsgrad des Brennstoffzellensystems und des Hybridsystems für die verwendeten Betriebsstrategien

Eine weitere Simulation mit dem Leistungsbedarfsprofil nach Abbildung 6.5 und einer konstanten Brennstoffzellenleistung (BS 1) führt mit dem aktuellen APU-System zu einem Hybridsystemwirkungsgrad von 27,2 % und einem Brennstoffzellensystemwirkungsgrad von 29 %. Bei diesem Profil werden lediglich 5 parallele Zellen benötigt.

In diesem Abschnitt wurde die aktive Verschaltung des Hybridsystems untersucht. Bei dieser Verschaltungsart gibt es einen großen Einfluss der Betriebsstrategie auf den Wirkungsgrad des Systems und die Batteriedimensionierung. Die Brennstoffzelle mit einer konstanten Leistung zu betreiben, führte zu dem höchsten Systemwirkungsgrad. Durch eine zunehmende dynamische Änderung der Brennstoffzellenleistung sinkt der Wirkungsgrad weiter ab. In diesem Abschnitt wurden die Leistungsbedarfsprofile entsprechend den Abbildungen 6.4 und 6.5 betrachtet. Bei dem Leistungsbedarfsprofil entsprechend Abbildung 6.4 müssen bei einem konstanten Brennstoffzellenbetrieb große Energiemengen in der Batterie gespeichert werden. Dieses Profil benötigt somit eine Batterie mit bis zu 20 parallelen Zellen bei Betriebsstrategie 1. Bei dem Leistungsbedarfsprofil entsprechend Abbildung 6.5 treten sehr schnelle Schwankungen im Leistungsbedarf auf. Bei diesem Profil müssen nur geringe Energiemengen kurzzeitig gespeichert werden und es werden bei der Betriebsstrategie 1 lediglich 5 parallele Zellen benötigt. Diese beiden Profile stellen hinsichtlich der zu speichernden Energie und den dynamischen Leistungsbedarfsänderungen Extreme dar. Ein beliebiges Leistungsbedarfsprofil stellt eine Mischung aus diesen beiden Profilen dar. Bei den hier vorgestellten Simulationen wurde der Einfluss des Startvorgangs vernachlässigt. Es wurde davon ausgegangen, dass die Brennstoffzelle direkt zu Beginn eine Leistung bereitstellen kann. Der Startvorgang des Systems zusammen mit den Leistungsbedarfsprofilen wird im folgenden Abschnitt untersucht. In diesem Zusammenhang wird auch das bisher nicht betrachtete Leistungsbedarfsprofil aus Abbildung 6.3 aufgegriffen.

### 6.2.3 Startvorgang des Systems

Nach den Simulationen mit der Annahme von vorgewärmten Komponenten am Betriebsstart wurde weiterhin der Startvorgang des Brennstoffzellensystems in die Hybridsystemsimulationen integriert. Für diese Simulationen wurden die in Kapitel 5 entwickelten Startkonzepte aufgegriffen. Als Leistungsbedarfsprofil wurde das Profil entsprechend Abbildung 6.4 gewählt. Diese Simulationen wurden mit 40 parallel geschalteten Batteriezellen und Betriebsstrategie 1 (konstante Brennstoffzellenleistung) durchgeführt. Die Stromverläufe während der gekoppelten Simulation von Startvorgang und Hybridbetrieb sind in Abbildung 6.14 gezeigt.

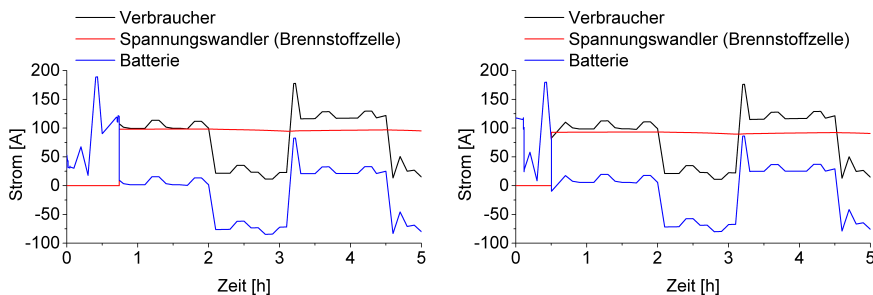


Abb. 6.14: Gekoppelte Simulation von Startvorgang und Hybridbetrieb. Links: thermischer Startvorgang, rechts: elektrischer Startvorgang

Im Gegensatz zu den bisherigen Hybridsimulationen muss das System zuerst aufgeheizt werden. Für den Aufheizvorgang werden die Randbedingungen, wie in Kapitel 5 beschrieben, gewählt. Beim thermischen Startvorgang wird das System durch einen Startbrenner aufgewärmt. Es wird zuerst die Brennstoffzelle und anschließend das Brenngaserzeugungssystem aufgewärmt. Bei der Brennstoffzelle wird, wie in Kapitel 5 beschrieben, von einer Gewichtsreduktion auf 20 % des aktuellen Gewichts ausgegangen. Beim elektrischen Startvorgang wird das Brenngaserzeugungssystem durch eine elektrische Beheizung der zugeführten Medien aufgeheizt und gezündet. Die Abwärme des Systems wird anschließend verwendet, um die Brennstoffzelle aufzuwärmen. Die Brennstoffzelle liefert erst eine Leistung, sobald das Brenngaserzeugungssystem aufgeheizt und gezündet wurde und auch die Brennstoffzelle auf 140 °C aufgeheizt ist. Die Batterie deckt zu diesem Zeitpunkt sowohl den Leistungsbedarf der Anwendung, als auch die benötigte elektrische Energie für den Startvorgang des Systems ab. Im linken Teil der Abbildung 6.14 ist die Simulation basierend auf dem thermischen Startvorgang dargestellt. Bei diesem Startvorgang wird die benötigte Energie zur Aufheizung des Systems durch die Verbrennung des Kraftstoffs zugeführt. Für den Betrieb des Startbrenners wird ein zusätzlicher Verdichter benötigt, der während des gesamten Startvorgangs betrieben wird. Die Leistungsaufnahme des Startbrenners wurde in Kapitel 5 in Abbildung 5.2 gezeigt. Der elektrische Startvorgang ist im rechten Teil von Abbildung 6.14 dargestellt. Bei diesem Startvorgang tritt zu Beginn ein hoher elektrischer Leistungsbedarf von 2,3 kW auf. Dieser führt zu hohen Strömen von bis zu

120 A. Nach der Aufheizung des Brennstoffzellensystems ist der Leistungsbedarf bei diesem Konzept geringfügig geringer als beim thermischen Startvorgang. Bei diesem Startvorgang ist die Brennstoffzelle, wie bereits in Kapitel 5 gezeigt, früher bereit die benötigte Leistung zu produzieren. Der Ladezustand während des Betriebs der APU ist in Abbildung 6.15 für diese Startvorgänge und den Fall ohne Startvorgang dargestellt. Ohne Startvorgang variiert der Ladezustand der Batterie mit 40 parallelen Zellen und einem anfänglichen Ladezustand von 60 % zwischen 51 % und 73 %. Durch die Startvorgänge sinken die Ladezustände der Batterie jedoch deutlich ab. Für den thermischen Startvorgang variiert dieser zwischen 35 % und 63 % und für den elektrischen Startvorgang zwischen 39 % und 66 %. Der Ladezustand sinkt bei dem thermischen Startvorgang weiter ab, da dieser länger dauert und die Batterie während des Startvorgangs den gesamten Leistungsbedarf decken muss. Der Hybridsystemwirkungsgrad sinkt durch den Startvorgang von 29,3 % auf 25,4 % für den thermischen Startvorgang und 25,3 % für den elektrischen Startvorgang ab.

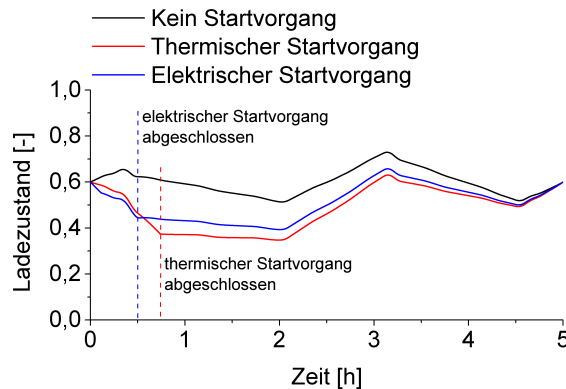


Abb. 6.15: Gekoppelte Simulation von Startvorgang und Hybridbetrieb. Ladezustand der Batterie für verschiedene Startvorgänge

Der Startvorgang des Systems hat somit einen großen Einfluss auf den Wirkungsgrad des Systems. Durch das Absinken des Ladezustandes wirkt sich der Startvorgang auch auf die Dimensionierung der Batterie aus. Die Betriebsstrategie 1 führte in den Simulationen ohne Startvorgang zu dem höchsten Wirkungsgrad, aber auch der größten Batterie. Deshalb wurde der Einfluss der Betriebsstrategie zusammen mit dem Startvorgang erneut untersucht. Die Ladezustandskurven für die Simulationen mit dem thermischen Startvorgang und den Betriebsstrategien 1 bis 3 sind in Abbildung 6.16 gezeigt. Der Bereich in dem das Brennstoffzellensystem gestartet wird, ist unabhängig von der Betriebsstrategie. In dieser gekoppelten Simulation gibt es nur geringe Unterschiede in den Extremwerten des Ladezustandes. Bei Betriebsstrategie 1 tritt eine Variation zwischen 35 % und 63 % auf. Der Ladezustand liegt bei BS 2 zwischen 37 % und 62 % und bei BS 3 zwischen 37 % und 60 %. Die Betriebsstrategie hat bei der

Berücksichtigung des Startvorgangs und dem verwendeten Leistungsbedarfsprofil einen sehr geringen Einfluss auf die Dimensionierung der Batterie. Wenn das System ohne die Verwendung von Abwärme der Anwendung gestartet werden muss, sollte Betriebsstrategie 1 oder 2 gewählt werden. Bei diesen ist für den betrachteten Fall die Abweichung im Wirkungsgrad mit 0,04 Prozentpunkten sehr gering.

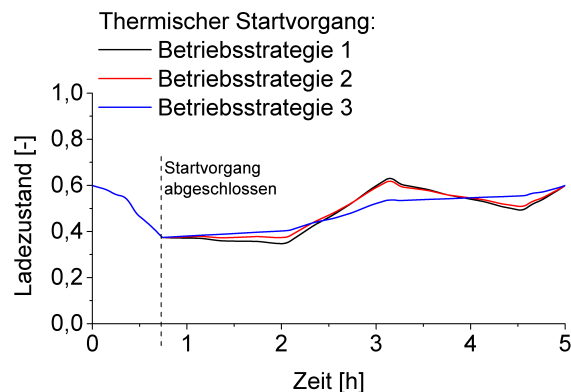


Abb. 6.16: Gekoppelte Simulation von Startvorgang und Hybridbetrieb. Einfluss der Betriebsstrategie auf den Ladezustand

Die Batteriedimensionierung wird stark durch den Leistungsbedarf während des Startvorgangs bestimmt. Aus diesem Grund wurde untersucht wie sich ein vorgezogener Startvorgang auf das System auswirkt. Dieser Startvorgang wird durchgeführt, bevor ein Leistungsbedarf anfällt. Für die betrachtete Batterie mit 40 parallelen Zellen ergibt sich ein Ladezustand von 56 % nach dem thermischen Startvorgang und 55,2 % nach dem elektrischen Startvorgang. Der Ladezustand variiert beim thermischen Konzept zwischen 49 % und 71 %. Beim elektrischen Startvorgang fällt dieser Bereich mit 48 % bis 71 % geringfügig größer aus. Der Systemwirkungsgrad des Hybridsystems wurde für den vorgezogenen Start zu 26,2 % für den thermischen Startvorgang und 25,8 % für den elektrischen Startvorgang und Betriebsstrategie 1 bestimmt. Diese Werte lagen bei 25,4 % für den gleichzeitigen thermischen und 25,3 % für den gleichzeitigen elektrischen Startvorgang. Der vorgezogene Startvorgang sollte wenn möglich implementiert werden.

Neben dem vorgezogenen Startvorgang wurde auch der Einfluss einer bereits aufgeheizten Brennstoffzelle untersucht. Bei diesen Simulationen wurde davon ausgegangen, dass die Brennstoffzelle zu Beginn des Leistungsbedarfes bereits aufgeheizt ist. Bei der Anwendung der Bordstromversorgung könnte die während der Fahrt produzierten Abwärme des Verbrennungsmotors zur Aufheizung der Brennstoffzelle verwendet werden. Das Brenngaserzeugungssystem musste bei diesen Simulationen weiterhin, ausgehend von der Umgebungstemperatur, aufgeheizt und gestartet werden. Sowohl für den thermischen als auch für den elektrischen Startvorgang ergibt sich unter diesen Voraussetzungen ein Hybridsystemwirkungsgrad von 28,1 % über das

Leistungsbedarfsprofil. Es wird deutlich, dass ein vorgezogener Startvorgang einem Startvorgang, der gleichzeitig mit dem Leistungsbedarf beginnt, vorzuziehen ist. Weiterhin sollte wenn möglich die Abwärme der Anwendung für den Startvorgang verwendet werden, da der Wirkungsgrad dadurch signifikant erhöht wird.

Des Weiteren wurde das Leistungsbedarfsprofil nach Abbildung 6.3 untersucht. Bei diesem Profil wurde davon ausgegangen, dass die benötigte Leistung der LKW-Kabine während der Fahrt durch die Lichtmaschine des LKWs erzeugt wird. Die APU wird ausschließlich für den Betrieb während der Pausenzeiten des Systems eingesetzt. Bei den Simulationen dieser Anwendung wurde davon ausgegangen, dass die Brennstoffzelle immer zu Beginn der langen Pause, die um 17:30 Uhr anfängt, gestartet wird. In der ersten Simulation wurde angenommen, dass die Brennstoffzelle nur in dieser ersten langen Pause gestartet wird und danach ausgeschaltet wird. In den darauffolgenden Pausen wird die Leistung durch die Batterie bereitgestellt. Aus den Simulationen ergab sich für diesen Fall ein Hybridsystemwirkungsgrad von 28,3 %. In einer weiteren Simulation wurde davon ausgegangen, dass die Brennstoffzelle beim Start der APU bereits vorgeheizt ist. Die Stromverläufe dieser Simulation sind in Abbildung 6.17 links dargestellt. Bei dieser Simulation wurde die Brennstoffzelle weiterhin nur in der langen Pause betrieben.

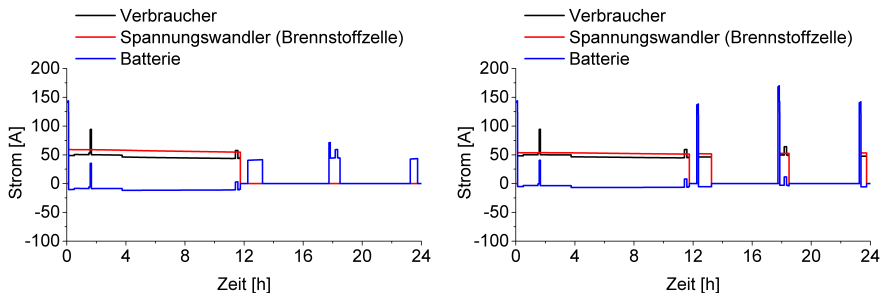


Abb. 6.17: Simulation des Leistungsbedarfes von einer LKW-Kabine über einen Tag. Links: Betrieb der Brennstoffzelle in der langen Pause, rechts: Betrieb der Brennstoffzelle in allen Pausenzeiten

Der Wirkungsgrad ist mit 30 % wesentlich höher, als im Fall bei dem die Brennstoffzelle noch aufgeheizt werden muss. In einer zweiten Simulation, die in Abbildung 6.17 rechts dargestellt ist, wurde die Brennstoffzelle auch für die kürzeren Pausen gestartet und betrieben. Hier wurde auch angenommen, dass die Brennstoffzelle bereits vorgeheizt ist und nur das Brenngaserzeugungssystem gestartet werden muss. Durch die vielen Startvorgänge des Systems sinkt der Wirkungsgrad auf 28,8 % ab. Die Änderung im Ladezustand ist für diese beiden Fälle in Abbildung 6.18 dargestellt.

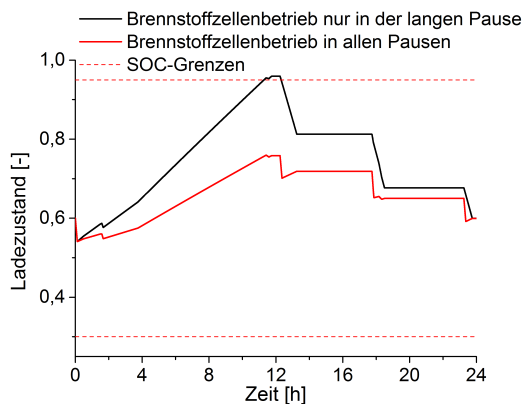


Abb. 6.18: Simulation des Ladezustands bei der Versorgung einer LKW-Kabine

Bei dem ausschließlichen Betrieb der Brennstoffzelle während der langen Pause muss die Batterie in dieser Zeit aufgeladen werden. Die Brennstoffzelle muss während dieser Pause die über den gesamten Tag benötigte Energie bereitstellen. Dies führt zu einer starken Erhöhung des Ladezustandes der Batterie. In den nachfolgenden Pausen sinkt der Ladezustand der Batterie wieder auf den anfänglichen Wert ab. Wenn die Brennstoffzelle auch für die kürzeren Pausen gestartet wird, muss die Brennstoffzellenleistung kleiner gewählt werden. Die Batterie wird nicht so stark aufgeladen. Der Anstieg des Ladezustandes zu Beginn ist dadurch zu erklären, dass die Brennstoffzelle mit der durchschnittlich benötigten Leistung betrieben wurde. Die Brennstoffzelle müsste in der langen Pause mit einer etwas geringeren und in den kurzen Pausen mit einer etwas höheren Leistung betrieben werden. Für eine kleine Batterie wäre es ideal, wenn in jeder Pause nur die für diese Pause benötigte Energie für den Leistungsbedarf und den Startvorgang produziert würde und der Ladezustand nahezu konstant gehalten würde.

## 6.3 Fazit Hybridisierung

In diesem Kapitel wurde die Hybridisierung des Brennstoffzellensystems für die Anwendung der Bordstromversorgung untersucht. Prinzipiell sind sowohl die passive, als auch die aktive Hybridverschaltung für die Anwendung der Bordstromversorgung geeignet. Bei dem passiven Hybridsystem muss die Brennstoffzelle für den Betriebspunkt der durchschnittlich benötigten Leistung auf die offene Zellspannung der Batterie ausgelegt werden. Die Batterie muss die Abweichungen zwischen dem Leistungsbedarf und der von der Brennstoffzelle bereitgestellten Leistung abdecken. Für den betrachteten Anwendungsfall führt das dazu, dass die Batterie sehr groß dimensioniert werden muss. Die Brennstoffzelle liefert bei diesem Konzept eine Leistung in einem sehr kleinen Leistungsbereich. Für den betrachteten Fall lag die Brennstoffzellenleistung in dem Bereich zwischen 1650 W und 2000 W. Die Variation der Brennstoffzellenleistung nimmt mit zunehmender Batteriegröße ab. Die Leistungsänderung der Brennstoffzelle ist nur

geringfügig von dem Leistungsbedarfsprofil abhängig. Die Änderung der Brennstoffzellenleistung ist auf die Spannungsänderung, die sich aus der Änderung des Ladezustandes der Batterie ergibt, zurückzuführen. Die Brennstoffzelle muss bei der Verwendung in einer passiven Hybridverschaltung auf das Leistungsbedarfsprofil einer Anwendung ausgelegt werden. Durch dieses Leistungsbedarfsprofil und die gewünschte Spannung wird die Anzahl der Brennstoffzellen und die Zellfläche bestimmt. Bei einem anderen Leistungsbedarfsprofil, mit einem abweichenden durchschnittlichen Leistungsbedarf, wird durch diese Brennstoffzelle zuviel oder zu wenig elektrische Energie produziert. Für den Fall, dass die Brennstoffzelle eine zu hohe Leistung liefert, kann sie von der Batterie entkoppelt und ausgeschaltet werden, um eine Überladung der Batterie zu vermeiden. Bei einer zu geringen Leistung der Brennstoffzelle kann es sein, dass die Batterie vollständig entladen und das System dadurch geschädigt wird. Diese Verschaltungsart sollte für eine Anwendung verwendet werden, bei der die Leistungsbedarfsprofile nur geringfügig variieren und nicht auf eine Änderung der durchschnittlichen Leistung reagiert werden muss.

Bei dem aktiven Hybridsystem ist eine Anpassung der bereitgestellten Leistung möglich. Für die aktive Hybridverschaltung wurde der Einfluss der Betriebsstrategie auf den Wirkungsgrad des Systems und auf die benötigte Batteriegroße untersucht. Der Wirkungsgrad des Hybridsystems betrug bei einem konstanten Betrieb des Brennstoffzellensystems 29,3 %. Dieser sinkt beim dynamischen Betrieb des Systems auf 28,9 % bei einer Variation der Leistung zwischen den Werten von 1,5 kW und 2,6 kW ab. Durch einen zunehmend dynamischeren Betrieb sank der Wirkungsgrad auf 28,1 % bzw. 26,1 % ab. Das starke Absinken für Betriebsstrategie 4 ist auf den geringen Wasserstoffnutzungsgrad bei einer benötigten Leistung von unter 1 kW zurückzuführen. Die Batterie konnte durch den dynamischen Betrieb der Brennstoffzelle um bis zu 87 % kleiner dimensioniert werden. Es zeigte sich weiterhin, dass das Leistungsbedarfsprofil nach Abbildung 6.5 für die Auslegung des Hybridsystems unkritisch ist. Bei diesem Profil werden kurzzeitig große Leistungen benötigt und die Batterie kurz danach wieder aufgeladen. Für jede Anwendung, und somit jedes Leistungsbedarfsprofil, muss das Hybridsystem hinsichtlich der Batteriedimensionierung und der Betriebsstrategie optimiert werden.

Die gekoppelte Untersuchung des Hybridbetriebs mit dem Startvorgang zeigte, dass der Startvorgang sowohl die Batteriedimensionierung, als auch den Wirkungsgrad des Systems stark beeinflusst. Der Wirkungsgrad sank für das betrachtete Profil unter Verwendung des thermischen Startvorgangs von 29,3 % auf 25,4 % und bei dem elektrischen Startvorgang auf 25,3 % ab. Für den thermischen Startvorgang wurden 40 parallele Zellen verwendet, während für den Fall ohne Startvorgang 15 parallel verschaltete Zellen ausreichten. Die Wahl der Betriebsstrategie hat einen geringen Einfluss auf die Dimensionierung der Batterie. Zur Erreichung eines hohen Wirkungsgrades sollte eine Betriebsstrategie ausgewählt werden, bei der die Brennstoffzelle nur wenig dynamisch betrieben wird. Es zeigte sich, dass das System aufgeheizt werden sollte, bevor eine Leistung benötigt wird. Der vorgezogene Startvorgang führt zu einem geringfügig höheren Wirkungsgrad, jedoch im betrachteten Fall zu einer Halbierung der benötigten Batteriegroße. Neben dem vorgezogenen Startvorgang wurde der Einfluss einer durch die Abwärme des Verbrennungsmotors vorgeheizten Brennstoffzelle untersucht. Für diesen Fall erhöhte sich der Wirkungsgrad auf 28,1 %. Bei der Anwendung der APU sollte das System wenn möglich



vorher gestartet und wenn möglich sogar die Brennstoffzelle durch Abwärme der Anwendung vorgeheizt werden.

Die in diesem Kapitel durchgeführten Berechnungen und Simulationen haben gezeigt, dass das Brennstoffzellensystem für die Anwendung der Bordstromversorgung durch eine aktive Hybridverschaltung mit einer Batterie gekoppelt werden sollte. Durch die Vernetzung der beiden Punkte Startvorgang und Hybridisierung konnte gezeigt werden, dass der Startvorgang eine wichtige Rolle bei der Dimensionierung des Hybridsystems spielt. Nur durch die gemeinsame Optimierung dieser beiden Punkte kann ein dynamisches und effizientes System entwickelt werden. Der Startvorgang wird neben der Betriebsweise stark durch den Aufbau des Systems beeinflusst. In Kapitel 7 wird eine Methodik zur Entwicklung eines kompakten Brenngaserzeugungssystems entwickelt. Diese soll die Gesamtmethodik zur Systementwicklung abrunden.

## 7 Packaging des Brenngaserzeugungssystems

Eine kompakte Bauweise ist eine wichtige Anforderung an ein Brenngaserzeugungssystem für mobile Anwendungen. Im ersten Teil dieses Kapitels wird die Entwicklung einer Methodik zur Simulation und Entwicklung eines kompakten Packages beschrieben. Zuerst wird eine Netzstudie, basierend auf dem autothermen Reformer ATR 9.2, präsentiert. In dieser Netzstudie wurden verschiedene Vernetzungsmethodiken angewandt, um Rechengitter zu erzeugen. Die mit diesen Rechengittern durchgeführten Simulationen wurden anschließend hinsichtlich ihrer Rechenzeit und den Ergebnissen der Simulation verglichen. Weiterhin wurde mit der Vernetzungsmethodik ein Wärmeübertrager entwickelt und die Simulationsmethodik mit Experimenten validiert. Mit dieser Methodik wurden Komponenten für zwei neue Packagegenerationen entwickelt. Diese Packagegenerationen sind die Packages 5 und 6. In Package 5 wird der thermische Startvorgang mit dem Startbrenner aus Kapitel 5 umgesetzt. Package 5 wird das erste Jülicher Brenngaserzeugungspackage mit einem thermischen Startvorgang sein. Package 6 basiert auf dem elektrischen Startvorgang. Für dieses Konzept werden detaillierte strömungsdynamische Berechnungen der Einzelkomponenten durchgeführt.

### 7.1 Simulationsmethodik zur Packageentwicklung

Die Simulation des Packages wurde zuerst für das vorhandene Package 3 durchgeführt. Bei diesem Package wurde der Reformer und der Wassergasshiftreaktor zusammenhängend simuliert. Der Reformer ATR 9.2 wurde in vorherigen Arbeiten [25] nur als zweidimensionales rotationssymmetrisches Bauteil simuliert. Für diesen Reformer wurde eine Studie hinsichtlich des Rechnernetzes durchgeführt. Es wurde der Reformer ausgewählt, da im Reformer die größten Größenunterschiede auftreten. So treten im Reformer große Volumenkörper in der Gasphase, jedoch auf enge Ringspalte, kleine Bohrungen und dünne Bleche auf. Diese Größenunterschiede treten teilweise auch auf die anderen Reaktoren auf, überwiegen jedoch beim Reformer. Für die Auslegung durch strömungsdynamische Simulationen müssen hier sowohl die Gasphase, als auch die Feststoffe vernetzt und berechnet werden. Dies macht die Geometrievorbereitung und die Vernetzung der Komponenten sehr aufwendig. Die kleinen Bohrungen und die dünnen Bleche müssen sehr eng vernetzt werden, wobei die Volumenkörper grundsätzlich gröber vernetzt werden könnten. An den Grenzflächen zwischen zwei Körpern gibt es zwei Vernetzungsmöglichkeiten. Die Volumenkörper können mit konformen Grenzflächen oder mittels Interfaces vernetzt werden. Bei der konformen Grenzflächenvernetzung sind die Knotenpunkte der beiden Volumenkörper auf der Grenzfläche identisch. Weiterhin sind auch die aneinandergrenzenden Flächen identisch. Bei der konformen Vernetzung von zwei unterschiedlich großen Volumenkörpern wird die größere Fläche in mindestens zwei Flächen aufgeteilt. Sie setzt sich aus der

Fläche des kleineren Körpers und des Rests zusammen. Die Vernetzung der einzelnen Komponenten mit konformen Grenzflächen führt für eine konstante Größe der Zellen zu einer hohen Zellanzahl in den großen Volumenkörpern und damit zu einer langen Rechenzeit. Aus diesem Grund müssen die Zellen in den Volumenkörpern von außen nach innen größer werden. Durch diese Größenänderung kommt es zu einer Verformung der Zellen. Diese kann sich negativ auf die Konvergenz der Lösung auswirken. Somit ist ein Kompromiss hinsichtlich der Qualität des Netzes und der Anzahl der benötigten Zellen zu finden. Eine weitere Möglichkeit ist die Vernetzung mit Interfaces. An den Interfaces wird zwischen den beiden Volumenkörpern interpoliert. Die Knotenpunkte auf den beiden Seiten sind unabhängig voneinander und so können auch die Zellgrößen unabhängig voneinander gewählt werden. Die einzelnen Flächen müssen dann als Interfaces definiert werden. Bei komplexen Bauteilen kann es bei der Zuordnung der einzelnen Flächen zu Problemen kommen, da die Flächen nicht identisch sind und eventuell mehrere Flächen mit einer Fläche assoziiert werden müssen. Das Netz mit den Interfaces kann dann nicht mehr in den Löser eingelesen werden. Die Interpolation zwischen den Knotenpunkten führt außerdem zu einem höheren Rechenaufwand. Daher sollte diese Methode mit Bedacht angewendet werden. Beide Vernetzungsmethoden wurden bei der Netzstudie angewendet und miteinander verglichen.

Ein sehr komplexes Bauteil ist der Rohrwendelwärmeübertrager im Reformer. Die Rohrwendel ist für die Vernetzung mit der Sweep-Methode geeignet. So kann diese mit Hexaederzellen vernetzt werden. Dasselbe gilt für die Strömung innerhalb der Rohrwendel. Die Umströmung der Rohrwendel ist wesentlich schwieriger zu vernetzen. Ein Versuch den Volumenkörper, der die Rohrwendel umgibt, mit der Sweep-Methode zu vernetzen ist in Abbildung 7.1 dargestellt.

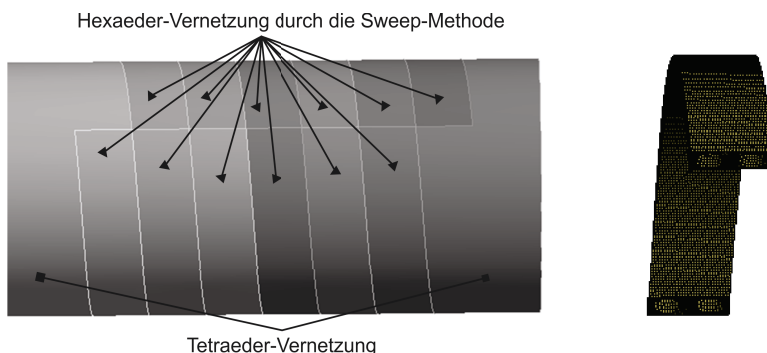


Abb. 7.1: Einteilung des Wärmeübertragers in mit der Sweep-Methode vernetzbare Abschnitte (links) und ein mit der Sweep-Methode erzeugtes Rechengitter für einen Abschnitt (rechts)

Der Volumenkörper wurde in mehrere mit der Sweep-Methode vernetzbare Körper eingeteilt. Im rechten Teil von Abbildung 7.1 ist ein Rechengitterabschnitt, der mit der Sweep-Methode vernetzt wurde, dargestellt. Um ein solches Netz zu erzeugen, muss zuerst der umhüllende Volumenkörper vernetzt werden. Anderenfalls könnte es sein, dass die benachbarten Rohre

unterschiedlich vernetzt werden und es zu einer großen Verformung bei dem Netz der den Wärmeübertrager umgebenden Gasphase kommen würde oder die Vernetzung fehlschlägt. An den Enden des Volumenkörpers bleiben zwei Bereiche übrig, die nicht mit der Sweep-Methode vernetzbar sind. An den Grenzflächen zwischen einem mit der Sweep-Methode vernetzten Abschnitt und den Endstücken entstehen kleine Pyramidenzellen, um den Übergang zwischen den Hexaederzellen und den Tetraedern zu gewährleisten. Diese Pyramidenzellen führen zu einem sehr hohen Wert ( $>0,95$ ) der Verformtheit des Netzes an dieser Stelle. Aus diesem Grund wird dieser Ansatz für die Vernetzung der Rohrwendel verworfen. Für die konforme Grenzflächenvernetzung bleibt an dieser Stelle nur die Vernetzung in einem hybriden Rechengitter mit einer Mischung aus Hexaedern und Tetraedern. Die vollständige Tetraedervernetzung soll hier nicht angewendet werden, da die Verwendung von Tetraedern in der Rohrwendel zu sehr kleinen Zellen oder einer großen Verformtheit im Rechengitter und zu einer schlechten Konvergenz führt. Die Vernetzung mit der hybriden Vernetzung für den Bereich des internen Wärmeübertragers ist in Abbildung 7.2 skizziert. Der dargestellte Bereich beinhaltet die Rohrwendel und das inner- und außerhalb strömende Fluid. Im linken Teil ist die Vernetzung mit konformen Grenzflächen dargestellt. Bei der Vernetzung wird zuerst die Rohrwendel und dann das innere Fluid durch die Sweep-Methode in Hexaederzellen unterteilt. Der Übergang zwischen den Hexaeder- und den Tetraederzellen wird durch Pyramidenzellen realisiert. Auf den Hexaederzellen wird automatisch eine Zellschicht aus Pyramidenzellen gebildet, an die die Tetraederzellen angrenzen.

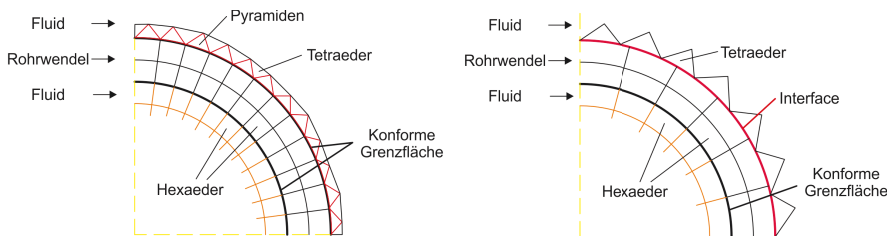


Abb. 7.2: Konforme Grenzflächenvernetzung (links) und Vernetzung mittels eines Interfaces (rechts)

Die Vernetzungsvariante mit Interfaces ist im rechten Teil von Abbildung 7.2 dargestellt. Bei dieser Variante werden weiterhin die Rohrwendel und das in der Rohrwendel strömende Fluid durch die Hexaedervernetzung eingeteilt. Zwischen der Rohrwendel und dem äußeren Fluid wird in diesem Fall ein Interface gesetzt. An dieser Schnittstelle stimmen die Knotenpunkte der benachbarten Volumenkörper nicht überein. Für die Lösung der Gleichungen muss der Wert im benachbarten Volumenkörper, an der Stelle des Knotenpunktes interpoliert werden. Somit wird ein zusätzlicher Rechenschritt benötigt. Das umhüllende Fluid wird bei dieser Vernetzung automatisch in Tetraeder eingeteilt. Die Verwendung der automatischen Interfaces stößt bei der Rohrwendel an ihre Grenzen. Die Oberfläche der Rohrwendel ist in viele kleinere Oberflächen eingeteilt. Diese Oberflächen stimmen nicht exakt mit den angrenzenden Oberflächen des Fluids überein. Deshalb gibt es bei der Zuordnung der Interfaces Schwierigkeiten. So muss eine

Fläche des Fluids mehreren Flächen der Rohrwendel zugeordnet werden. Der Abstand zwischen den einzelnen Flächen ist bei diesen Bauteilen sehr gering. Aus diesem Grund wurde an einer Methodik gearbeitet, um die Vernetzung mit den Interfaces auch bei komplexen Bauteilen einsetzen zu können. Bei dieser Methodik wird eine Mischung aus der konformen Vernetzung und der Vernetzung mittels Interfaces angewendet. Bei der konformen Vernetzung stimmen die Flächen der benachbarten Körper überein. Die Geometrie wird als ein Bauteil mit konformen Grenzflächen erstellt, wodurch die benachbarten Flächen übereinstimmen. Die Größenverhältnisse sind jedoch bei der konformen Vernetzung aneinander gekoppelt. Um dieses Problem zu umgehen, wird die Geometrie dupliziert. Somit liegen zwei identische Bauteile übereinander. Für jedes Bauteil kann dann unabhängig voneinander die Vernetzungsgröße gewählt werden. Bei einem Bauteil wird dann der Bereich außerhalb des Interfaces und beim anderen der Bereich innerhalb des Interfaces vernetzt. Die anderen Bereiche werden jeweils unterdrückt. Es ergeben sich zwei Bauteile, die jeweils intern mit konformen Grenzflächen vernetzt sind. Die Vernetzungsgröße der beiden Bauteile wurde jeweils unabhängig voneinander gewählt. Weiterhin existiert durch diese Methode eine Grenzfläche zwischen den beiden Bauteilen, bei der die Flächen auf beiden Seiten übereinstimmen. Diese Flächen können anschließend im Löser einander zugeordnet werden. Diese Methodik wird für die Vernetzung mit Interfaces angewandt.

Beide Vernetzungsmethoden wurden auf den Reformer ATR 9.2 angewendet. Bei der Vernetzung mit Interfaces wurde die Geometrie weiterhin an den Stellen vereinfacht, die nicht mit der Strömung in Kontakt kommen. Mit diesen Rechengittern wurde eine Aufheizsimulation des Reformers durchgeführt. Bei dieser Simulation wurden die Durchflüsse und Temperaturen entsprechend dem Experiment gewählt. Die Kurven der aufgenommenen Energie sind in Abbildung 7.3 dargestellt.

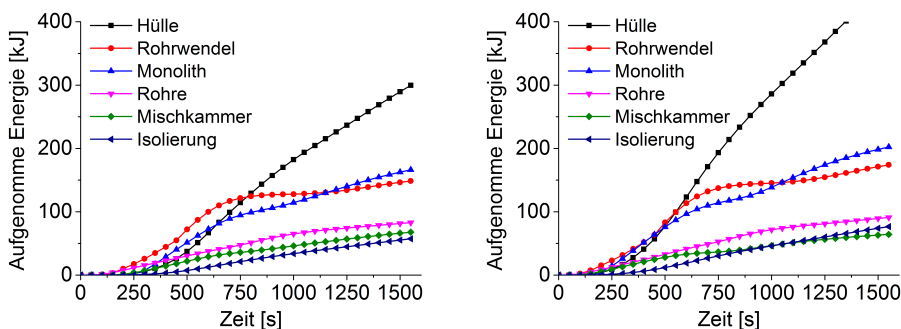


Abb. 7.3: Aufgenommene Energie während des Startvorgangs: Konforme Vernetzung (links) und Vernetzung mittels Interfaces (rechts)

Die Komponenten wärmen sich durch die Zufuhr von heißer Luft auf, wodurch die Kurven mit der Zeit ansteigen. Als Randbedingung für diese Simulation wurden die Temperaturverläufe aus dem Experiment gewählt. Die meiste Energie wird im Reformer durch die Reformerhülle aufgenommen. Die aufgenommene Energie nimmt in dem simulierten Zeitintervall nahezu

linear mit der Zeit zu. Bei der Vernetzung mittels Interfaces ist die Steigung dieser Kurve steiler als bei der konformen Grenzflächenvernetzung. Der Wärmeübergang an die Hülle des Reformers ist bei der Berechnung mit der Interface-Vernetzung geringfügig höher. Die Masse der Reaktorhülle wurde durch die Vereinfachung des Bauteils erhöht. Bei der Betrachtung der Temperaturen im Reformer wird jedoch deutlich, dass die Abweichung zwischen diesen beiden Kurven akzeptabel ist. Der Verlauf der Kurven für die Rohrwendel und den Monolithen zeigen einen sehr ähnlichen Verlauf für beide Fälle. Die anderen Komponenten zeigen ebenfalls für beide Vernetzungsmethoden einen ähnlichen Verlauf. Insgesamt stimmen die Ergebnisse der beiden Simulationen gut miteinander überein. Somit scheinen beide Vernetzungsmethoden für die Simulation des Reformers geeignet zu sein. Die Vernetzung mit Interfaces liefert ähnliche Ergebnisse wie die konforme Vernetzung. Beide Vernetzungsmethoden unterscheiden sich jedoch deutlich hinsichtlich der Anzahl der Elemente und der benötigten Rechenzeit. Durch die Vernetzung mit Interfaces wurde die Anzahl der Zellen von 34,5 Millionen auf 6,4 Millionen bzw. 2,9 Millionen reduziert. Dieser Zusammenhang ist in Abbildung 7.4 dargestellt. Bei der Interface-Vernetzung wurde 2 mm bzw. 3 mm als Zellgröße für die äußeren Elemente vorgegeben. Die Rechenzeit verkürzt sich durch diese Methode von 58 Tagen auf 8 Tage beziehungsweise 4,6 Tage. Beide Rechnungen wurden auf einem Rechencluster mit 16 Prozessoren durchgeführt.

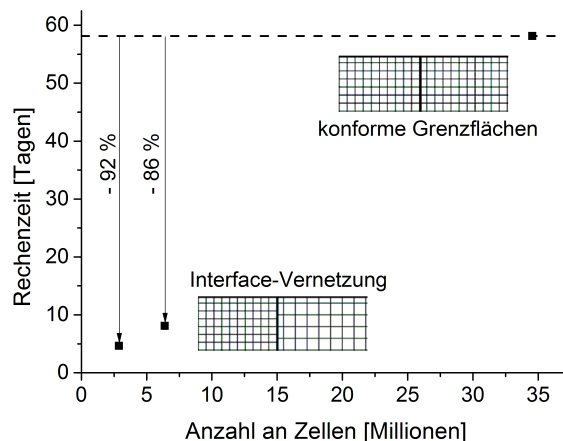


Abb. 7.4: Anzahl der Zellen und Rechenzeit mit 16 Prozessoren für die unterschiedlichen Vernetzungsmethoden

Durch die Vernetzungsmethode der Interface-Vernetzung mit konformen Oberflächen wurde die Rechenzeit um 86 % bzw. 92 % reduziert. Durch diese Vernetzungsmethode wurde die Berechnung von einer akademischen Herangehensweise auf eine Form gebracht, die für die Optimierung des Brenngaserzeugungssystems angewendet werden kann. Die Temperaturprofile während der Aufheizung sind für beide Fälle in Abbildung 7.5 dargestellt. Die Temperaturprofile sehen für beide Vernetzungsmethoden über den gesamten Zeitraum sehr ähnlich aus. Bei

der Vernetzung mit Interfaces wird der Wärmeübergang leicht überschätzt, sodass die Luft kälter in die Mischkammer gelangt und dafür die Luft am Austritt des Reformers durch den Wärmeübertrager stärker aufgewärmt ist. Die entwickelte Methodik ist für die Entwicklung und Optimierung eines kompakten Packages gut geeignet, da sie zu geringen Abweichungen zur Simulation mit einer feinen Einteilung führt und die benötigte Rechenzeit extrem verkürzt wird.

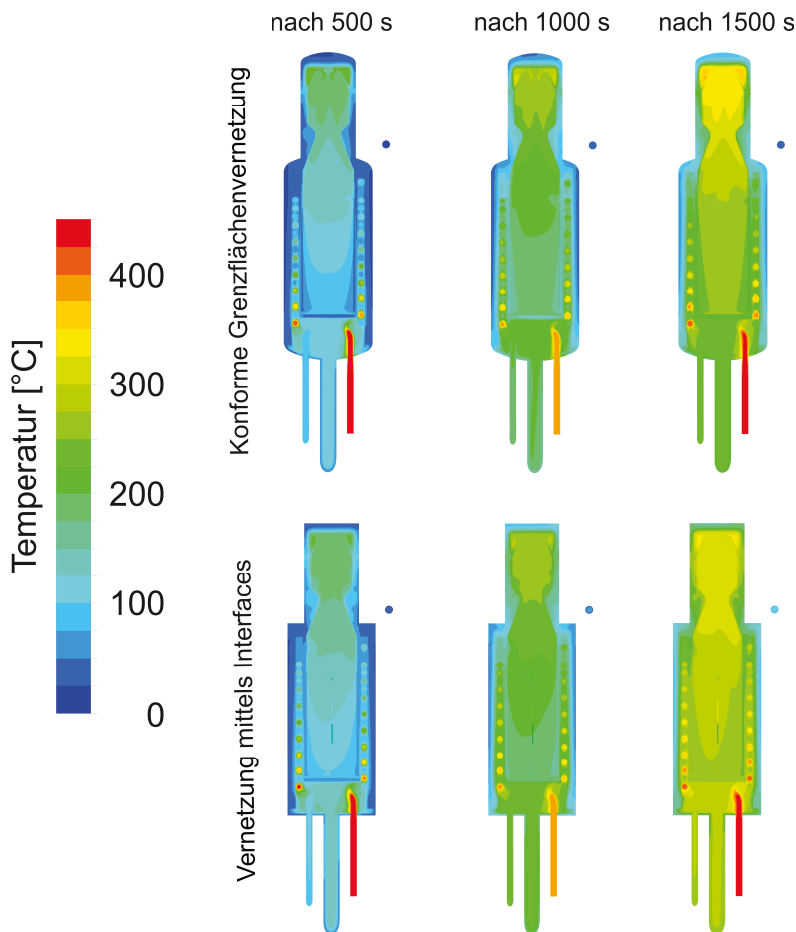


Abb. 7.5: Netzstudie: Temperaturprofile im Reformer ATR 9.2 während der Aufheizung für zwei Vernetzungsmethoden

### 7.1.1 Simulation des Packages 3

Als erstes wurde die neu entwickelte Methodik für ein vorhandenes Package angewandt. Der Reformer ATR 9.2 und der WGS 4 wurden für diese Simulation zusammen vernetzt und berechnet. Bei der Erstellung des Rechengitters wurde an ausgewählten Stellen die Interface-Vernetzung angewendet. Der Reformer ATR 9.2 wurde zum ersten Mal komplett dreidimensional simuliert. Desweiteren wurden zum ersten Mal mehrere Komponenten zusammenhängend simuliert. Dies wird für zukünftige Packageentwicklung immer wichtiger, da diese immer kompakter gebaut werden sollen und dadurch die Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Reaktoren steigen. Die Temperatur- und Druckprofile für die Komponenten sind in Abbildung 7.6 gezeigt.

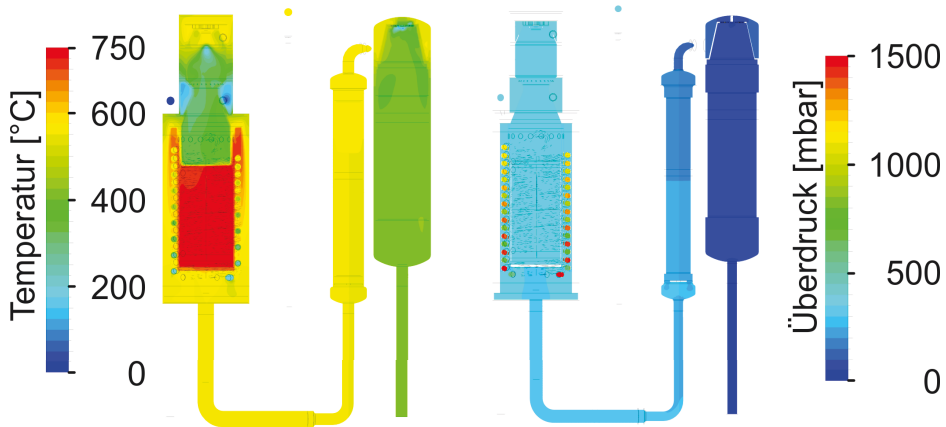


Abb. 7.6: Temperatur- und Druckverteilung während des stationären Betriebs bei Vollast für den Reformer und den Wassergasshiftreaktor in Package 3

Diese Simulation wurde mit einem Kraftstoffmassenstrom von 3037,5 g/h und den Luft zu Kohlenstoff- und Wasser zu Kohlenstoffverhältnissen von  $\frac{n(O_2)}{n(C)} = 0,47$  und  $\frac{n(H_2O)}{n(C)} = 1,9$  durchgeführt. Aus dieser Simulation wird ersichtlich, dass der Wärmeübertrager in diesem Fall nicht ausreichend dimensioniert wurde. Die Austrittstemperatur des Reformers ist mit über 500 °C deutlich zu warm für den Wassergasshiftreaktor. Dies wird im Systembetrieb teilweise durch die Wärmeverluste des Systems wieder ausgeglichen. Der Druckverlust von 1,5 bar in den beiden Komponenten wird größtenteils in der Rohrwendel verursacht. Der Druckverlust in der Rohrwendel alleine beträgt etwa 1 bar. Der Druckverlust im Wassergasshiftreaktor ist mit etwa 300 mbar ebenfalls sehr hoch. Der Druckverlust im Reformer wurde bei der Entwicklung des Reformers ATR 12 bereits minimiert. Der Druckverlust im Wassergasshiftreaktor muss im Rahmen einer Weiterentwicklung zu einer neuen WGS-Generation optimiert werden.

Mit der neuen Methodik können ganze Reaktoren und Packages simuliert werden. Dies wird im Folgenden für die Entwicklung der neuen Packages angewendet.



## 7.1.2 Simulationsunterstützte Wärmeübertragerentwicklung

Für die kompakte Packageentwicklung ist eine maßgeschneiderte Wärmeübertragerentwicklung von entscheidender Bedeutung. Die Wärmeübertrager im System sollen möglichst kompakt sein, müssen jedoch die geforderte Wärmemenge übertragen können. Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Rohrbündelwärmeübertrager entwickelt. Die Aufgabe des Wärmeübertragers ist es beim Reformer ATR 13 das Reformat abzukühlen und die Luft für den Reformer aufzuheizen. Dieser Wärmeübertrager soll im Rahmen eines weiteren APU-Systems eingesetzt werden. Der Wärmeübertrager wird aufgrund der großen Temperaturdifferenz von bis zu 500 K als Rohrbündelwärmeübertrager ausgeführt. Die auftretenden Spannungen, die durch Längenänderungen der Materialien entstehen, können bei diesem Wärmeübertrager durch einen Kompensator in der Wärmeübertragerhülle ausgeglichen werden. Der Wärmeübertrager wurde auf den Volllaststrom des Reformers ausgelegt. An diesem Betriebspunkt wird ein Massenstrom von 10,2 kg/h Reformat und ein Luftmassenstrom von 6 kg/h durch den Wärmeübertrager geleitet. Das Reformat soll von 540 °C auf 430 °C abgekühlt und die Luft von 76 °C auf 380 °C aufgeheizt werden. Für diesen Einsatzfall wurden zwei Wärmeübertrager entwickelt. Der Erste wurde für den Betrieb im Gleichstrom und der Zweite wurde für den Betrieb im Gegenstrom optimiert. Die Temperaturverteilung in diesen berechneten Wärmeübertragern, sowie die gefertigten Wärmeübertrager sind in den Abbildungen 7.7 und 7.8 dargestellt.

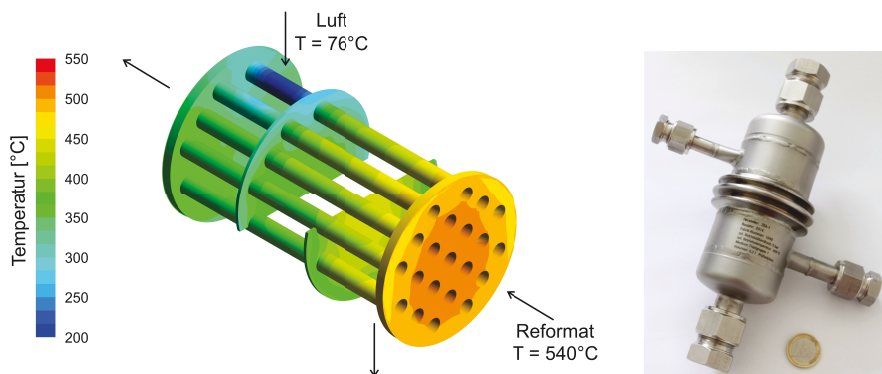


Abb. 7.7: Simulierter Temperaturverlauf an den Einbauten des Gegenstromwärmeübertragers (links) und Foto des Wärmeübertragers (rechts)

Der Temperaturverlauf des Gegenstromwärmeübertragers ist in Abbildung 7.7 links dargestellt. Das Reformat strömt in diesem Diagramm von unten rechts durch die Rohre nach oben links. Die Luft wird am Reformataustritt des Wärmeübertragers senkrecht auf die Rohre gegeben und strömt in einer Mischung aus Kreuz- und Gegenstrom an den Rohren und zwei Umlenkblechen vorbei in Richtung des Reformateintritts. Bei diesem Wärmeübertrager wurde untersucht, wie sich der Einbau eines Verteilerblechs am Eintritt in den Wärmeübertrager auswirkt. Durch den Einbau eines solchen Blechs konnte die maximale Strömungsgeschwindigkeit von 47 m/s auf 32 m/s reduziert werden. Der Druckverlust stieg für den Bereich, der vom Reformat durch-

strömt wird, von 9 mbar auf 11,5 mbar an. Ohne Einbauten in den Wärmeübertrager variiert der Wärmestrom zwischen 17 W und 36 W für die einzelnen Rohre. Die Homogenisierung in der Strömung führte zu einer Homogenisierung bei den Wärmeströmen. Die Wärmeströme variierten dadurch nur noch zwischen 20 W und 29 W. Der gesamte in dem Wärmeübertrager übertragene Wärmestrom blieb jedoch nahezu konstant. Die Graphiken mit der Geschwindigkeitsverteilung in den Rohren und eine Abbildung mit dem Wärmestrom für jedes Rohr befinden sich im Anhang. Da der Gesamtwärmestrom in der Simulation nahezu unverändert blieb, wurde der Wärmeübertrager ohne ein Blech zur Homogenisierung gefertigt. Die Fläche des Wärmeübertragers im Gegenstrom entspricht mit  $316 \text{ cm}^2$  in etwa der Hälfte der Fläche des Wärmeübertragers im Gleichstrom der in Abbildung 7.8 dargestellt ist. Bei diesem wurde die Berohrungsichte erhöht, sodass dieser mit 32 Rohren auf eine Fläche von  $620 \text{ cm}^2$  kommt. Bei diesem Wärmeübertrager wurde die Anzahl der Umlenkleche auf drei und die Rohrlänge von 87 mm auf 112 mm erhöht. Die benötigte Wärmeübertragungsfläche wurde für beide Fälle durch Formeln aus [76] als Ausgangspunkt für die strömungsdynamischen Simulationen berechnet. Die strömungsdynamische Optimierung führte im Vergleich zu der integralen Berechnung aus [76] zu einer um den Faktor 0,8 kleineren benötigten Wärmeübertragungsfläche.

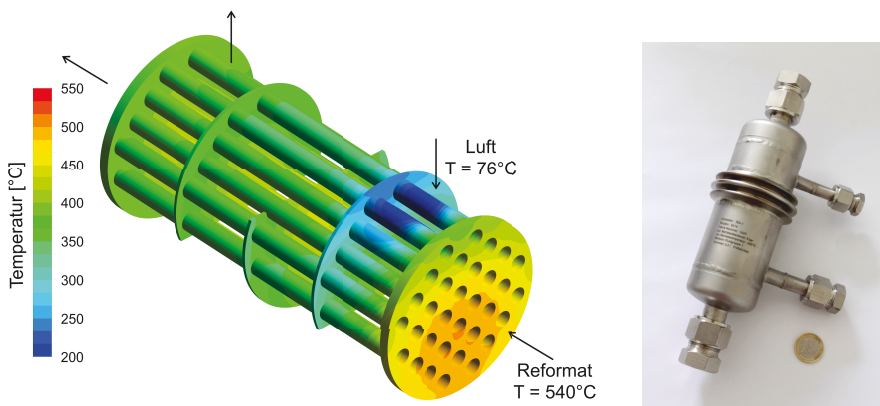


Abb. 7.8: Simulierter Temperaturverlauf an den Einbauten des Gleichstromwärmeübertragers (links) und Foto des Wärmeübertragers (rechts)

Die beiden Wärmeübertrager wurden in einem Teststand experimentell überprüft. Die Experimente konnten ausschließlich mit Luft durchgeführt werden. Aus diesem Grund wurden die Simulationen nochmals mit Luft durchgeführt. In Abbildung 7.9 sind die simulierten und die experimentellen Temperaturen für verschiedene Betriebszustände des Gegenstromwärmeübertragers gegenübergestellt. Die simulierten Temperaturen lagen bei allen Betriebszuständen oberhalb der gemessenen Temperaturen. Beim Auslegungspunkt des Wärmeübertragers wurden Temperaturen von  $431,4 \text{ °C}$  und  $370,6 \text{ °C}$  für das heiße und das kalte Fluid vorausgesagt. Bei den Experimenten ergab sich dazu eine Abweichung von 4,6 K beziehungsweise 3,7 K. Es wurde bei den Simulationen ein übertragener Wärmestrom von 465 W errechnet und aus der Abweichung ergibt sich ein Wärmeverlust von 25 W. Bei einem Betriebspunkt der 50 %

der Massenströme des Auslegungspunktes entspricht, sinkt der übertragene Wärmestrom wie erwartet ab. Die prozentuale Reduzierung des Wärmestroms ist geringer als die prozentuale Änderung der Massenströme. Somit sinkt die Temperatur auf der heißen Seite ab und die Temperatur auf der kalten Seite steigt weiter an. Der Wärmeverlust bleibt bei diesem Fall mit 25 W konstant, wodurch die Temperatur auf der kalten Seite mit 400 °C deutlich unter den berechneten 417 °C liegt. Weiterhin wurde jeweils auf nur einer Seite der Massenstrom auf 50 % reduziert. Bei der Reduzierung des heißen Stoffstroms sinkt die Temperatur wie erwartet auf beiden Seiten ab. Der berechnete Wärmeverlust sinkt durch die niedrigeren Temperaturen auf einen Wert von 4 W ab und die simulierten und gemessenen Temperaturen unterscheiden sich um 1 K. Für den Fall des reduzierten kalten Fluidstroms steigen die simulierten Temperaturen auf 469 °C bzw. 459 °C an. Der übertragene Wärmestrom ist mit 304 W geringer als im Fall des reduzierten heißen Fluidstroms. Der Wärmeverlust steigt für diesen Fall auf 44 W an. Der höhere Wärmeverlust ist durch die höhere Temperatur begründet. Dass der Wärmeverlust hauptsächlich auf der kalten Seite auftritt, ist nicht weiter verwunderlich, da das kalte Fluid durch den Mantelraum strömt und direkt mit der Hülle in Kontakt steht. Durch höhere Temperaturen im Mantelraum steigt auch der Wärmeverlust deutlich an. Die CFD-Methodik wurde erfolgreich an dem entwickelten Wärmeübertrager für den stationären Fall getestet und validiert.

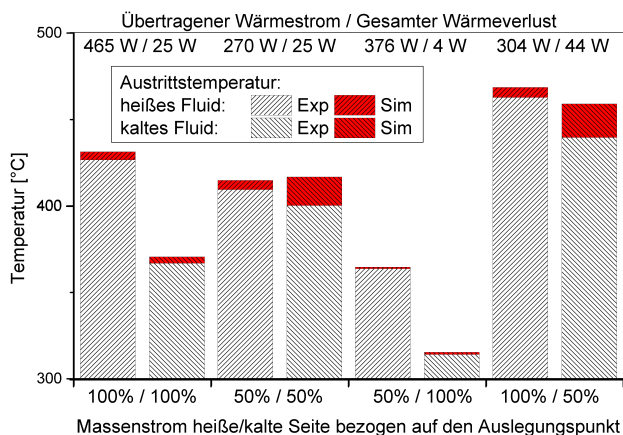


Abb. 7.9: Validierung der simulierten Temperaturen für verschiedene Betriebszustände des Gegenstromwärmeübertragers

An diesem Wärmeübertrager wurde weiterhin die Genauigkeit der dynamischen CFD-Simulation überprüft. Hierzu wurde der Wärmeübertrager für den Gegenstrom mit heißer Luft aufgeheizt. Die Ofentemperaturen wurden bei diesem Experiment auf 80 °C und 530 °C eingestellt. Die Verläufe der Eintrittstemperaturen in den Wärmeübertrager sind durch die rote und schwarze

Linien in Abbildung 7.10 dargestellt. Der Massenstrom wurde für Medium 1 zu 15,8 kg/h und Medium 2 zu 6 kg/h eingestellt. Die Temperaturverläufe am Ein- und Austritt des Wärmeübertragers wurden während des Experimentes gemessen und aufgezeichnet. Die Eintrittstemperaturen in den Reformier wurden als transiente Randbedingungen für den Wärmeübertrager genutzt. Der Wärmeübertrager folgt bei der Aufheizung sehr schnell dem Temperaturverlauf des Ofens. Die Aufheizzeit von ungefähr 500 Sekunden ist durch die Aufheizgeschwindigkeit des Ofens bestimmt. Die simulierten Werte liegen auch hier über den experimentell gemessenen Werten. Die Abweichung zwischen dem simulierten Temperaturverlauf und den experimentellen Daten steigt mit zunehmender Zeit an und erreicht dann einen konstanten Wert. Dies ist auf den mit der Temperatur steigenden Wärmeverlust zurückzuführen. Die Schwankung der Steuerung der Ofentemperatur beim Erreichen von 540 °C schlägt sich sowohl bei den Experimenten, als auch bei der Simulation in den Austrittstemperaturen nieder. Hier ist eine identische Schwankungsbewegung zu erkennen.

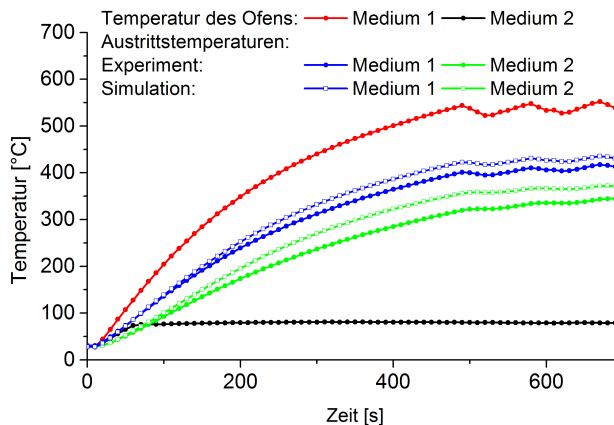


Abb. 7.10: Aufheizkurven des Gegenstrom Wärmeübertragers

Die Wärmeübertragerauslegung durch CFD-Simulationen führt zu einer sehr guten Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation. Die entwickelte Methodik lässt sich sehr gut in die Gesamtmethodik der Package- und Systementwicklung einbinden. Auf diese Methodik wird bei der Entwicklung von Package 5 zurückgegriffen.

## 7.2 Entwicklung eines neuen Packagekonzepts

Die in dieser Arbeit entwickelte Methodik zur Packageentwicklung wurde für die Entwicklung neuer Packages verwendet. In diese Packages sollen die in Kapitel 5 erarbeiteten Startkonzepte für das Brenngaserzeugungssystem einfließen. Wenn beide Konzepte in das selbe Package integriert würden, wäre das Package wesentlich größer als ein Package mit nur einem Startkonzept

und die Systemverschaltung wäre wesentlich aufwendiger. Aus diesen Gründen wurden zwei Packagekonzepte entwickelt.

Der Startvorgang mit dem Startbrenner wird in Package 5 umgesetzt. Für dieses Packagekonzept mit dem thermischen Startvorgang wurde auf existierende Brenngaserzeugungskomponenten zurückgegriffen. Neu in diesem Package sind der Start mit dem Startbrenner und ein neuer Wärmeübertrager als Reformat-/Luft-Wärmeübertrager. Der Wärmeübertrager für den Startvorgang wurde zudem im Rahmen dieser Arbeit entwickelt werden. Dieser muss in der Lage sein, Luft zu erhitzen und Wasser zu erhitzen, zu verdampfen und zu überhitzen. Als Reformat-/Luft-Wärmeübertrager wird ein Mikrostrukturwärmeübertrager verwendet, der für diesen Einsatz vom Karlsruher Institut für Technologie entwickelt wurde.

Der Startvorgang mit dem elektrischen Konzept wird in Package 6 weiter verfolgt. Bei diesem Package werden außerdem die Brenngaserzeugungskomponenten weiterentwickelt. Der Reformer ATR 12 wird mit einer internen elektrischen Heizung ausgestattet, um das elektrische Aufheizkonzept realisieren zu können. Während des Startvorgangs soll dann Wasser im Reformer verdampft werden. Die beiden Stufen des Wassergasshift-Reaktors werden in einen Reaktor integriert und der Katalytbrenner wird in Leichtbauweise ausgeführt. Dieser muss bei diesem Konzept in der Lage sein Reformat zu verbrennen.

In den folgenden Abschnitten wird auf die Kernpunkte der Entwicklung der beiden Packages eingegangen.

### 7.2.1 Package 5: Thermisches Aufheizkonzept

Das entwickelte thermische Startkonzept soll in Package 5 Anwendung finden. Bei den Brenngaserzeugungskomponenten von Package 5 wird auf bestehenden Reaktoren zurückgegriffen. Dazu gehören der Reformer ATR AH3, der Wassergasshiftreaktor WGS 4 und der Katalytbrenner KB 3. Die neuen Komponenten in diesem Package sind der Startbrenner der Firma Physitron, ein Wärmeübertrager für den Startvorgang und ein in Zusammenarbeit mit dem KIT entwickelter Mikrostrukturwärmeübertrager. In diesem Abschnitt wird die Entwicklung eines maßgeschneiderten Wärmeübertragers für den Startvorgang, der zu dem vorhandenen Startbrenner und den Anforderungen des Systems passt, beschrieben. Weiterhin wird eine Sensitivitätsanalyse hinsichtlich des Einflusses des Gegendrucks auf den Startbrennerbetrieb durchgeführt. Darauf folgend wird kurz auf Experimente, die mit dem Mikrostrukturwärmeübertrager durchgeführt wurden, eingegangen.

#### 7.2.1.1 Entwicklung eines Wärmeübertragers für den Startvorgang

Der Wärmeübertrager für den Startvorgang muss für den in Kapitel 5 entwickelten Startvorgang geeignet sein. Der Wärmeübertrager wird auf der einen Seite von dem Abgas des Startbrenners durchströmt. Das Medium auf der anderen Seite hängt von dem Zustand des Brenngaserzeugungssystems ab. Zu Beginn des Aufheizvorgangs strömt Luft durch den Wärmeübertrager

und soll für die Aufheizung des Systems auf eine Temperatur von 600 °C aufgewärmt werden. Der maximale Massenstrom an Luft wird durch die Auslegung des Luftverdichters für den stationären Zustand vorgegeben. Nachdem durch die Aufheizung mit der erwärmten Luft der Taupunkt im System überschritten wurde, kann Wasserdampf in das System geleitet werden. Die Zugabe von Wasserdampf mit einer konstanten Eintrittstemperatur von 600 °C beschleunigt die Aufheizung des Systems. Weiterhin wird der Wasserdampf benötigt, um den Kraftstoff im Reformers zu verdampfen und die Reaktion zu zünden. Somit muss der Wärmeübertrager in der Lage sein den benötigten Wasserdampf zu erzeugen. Das Wasser soll in den Wärmeübertrager eingedüst werden. Während des gesamten Betriebs des Startbrenners müssen die vorgegebenen Temperaturen eingehalten werden. Die Eintrittstemperatur des Wärmeübertragers soll maximal 900 °C und die Austrittstemperatur maximal 400 °C betragen. Die Austrittstemperatur wurde in diesem Fall aufgrund der nachfolgenden Komponenten gewählt. Im Systembetrieb soll später ein zweiter Wärmeübertrager für die Aufheizung der Brennstoffzelle verwendet werden. Durch niedrige Temperaturen kann ein Wärmeübertrager basierend auf günstigeren Werkstoffen ausgewählt werden. Beim alleinigen Betrieb des Packages wird der Abgasaustritt des Wärmeübertragers mit dem Abgasnachbehandlungsmodul verschaltet. Dieses ist ebenfalls auf eine maximale Temperatur von 400 °C ausgelegt. Die Austrittstemperatur der dem System zugeführten Medien soll eine Maximaltemperatur von 600 °C nicht überschreiten. Neben den Temperaturgrenzen sind auch die Druckverluste des Wärmeübertragers entscheidend. Die Verbrennungsluft des Startbrenners wird mittels eines Gebläses zugeführt. Dieses erlaubt einen maximalen Gegendruck von etwa 100 mbar. Die durch das Gebläse zur Verfügung gestellte Luftmenge sinkt jedoch mit steigendem Gegendruck ab. Der Druckverlust auf der Abgasseite des Wärmeübertragers spielt für den Systembetrieb ebenfalls eine entscheidende Rolle.

Im Rahmen einer Studienarbeit [100] wurde der Wärmeübertrager mit der in dieser Arbeit entwickelten Vernetzungs- und Simulationsmethodik optimiert. Die Wärmeübertragerfläche der Ausgangsgeometrie des Wärmeübertragers wurde wie bei dem Wärmeübertrager in Abschnitt 7.1.2 mit den Formeln aus [76] berechnet. Für den Wärmeübergangskoeffizienten des Wassers wurden zwei Extremwerte angenommen. Die Berechnung wurde zum einen mit dem Wärmeübergangskoeffizienten von Wasserdampf berechnet und zum anderen wurde ein unendlich großer Wärmeübergangskoeffizient verwendet. Der zweite Fall entspricht der Annahme, dass der Wärmeübergang vom Abgas an die Wärmeübertragerwand der bestimmende Vorgang für die Wärmeübertragung ist. Für die Rohrlänge des Wärmeübertragers wurde durch diese beiden Berechnungen ein Intervall zwischen 452 mm und 587 mm bestimmt. Diese beiden Werte stellen Extremwerte dar. Die Geometrie des Wärmeübertragers für die Simulation basiert auf einer Rohrlänge von 435 mm. Diese Länge wurde gewählt, da es bei dem vorher entwickelten Wärmeübertrager und der integralen Berechnung nach [76] zu einer Abweichung, um den Faktor 0,8, kam. Aus diesem Grund wurde die Länge hier ebenfalls mit diesem Wert skaliert. Weiterhin weist der Wärmeübertrager so in etwa die gleiche Höhe wie der Reformers auf, sodass das Package durch den Wärmeübertrager nicht höher wird.

Der Gegendruck des Startbrenners wurde für den Fall des Packagebetriebs zu 70 mbar bestimmt. Dieser Gegendruck setzt sich aus dem Druckverlust des Wärmeübertragers und des

Abgasnachbehandlungsmoduls zusammen. Der Druckverlust des Wärmeübertragers wurde auf maximal 20 mbar abgeschätzt. Aus dem Gegendruck von 70 mbar ergibt sich aus der Verdichterkennlinie ein Luftvolumenstrom von  $18,3 \text{ Nm}^3/\text{h}$ . Die erste Phase des Startvorgangs, bei der Luft erwärmt wird, wurde mit einer Leistung von 5 kW berechnet. Für diesen Fall ergab sich eine Abgastemperatur von  $370^\circ\text{C}$  und eine Lufttemperatur von  $635^\circ\text{C}$  nach dem Wärmeübertrager. In der zweiten Phase wird die maximale Menge an Luft von  $14 \text{ kg/h}$  und zusätzlich Wasser zugegeben, um den Startvorgang zu beschleunigen. In dieser Phase soll der Startbrenner mit einer Leistung von 6,7 kW betrieben werden. Diese Leistung ergibt sich aus der Luftmenge, die dem Startbrenner zugeführt wird, und der maximalen Abgastemperatur von  $900^\circ\text{C}$  am Eintritt in den Wärmeübertrager. Die Leistung darf erst nach einer Zugabe von Wasser erhöht werden, da sonst die Austrittstemperatur der Luft auf über  $800^\circ\text{C}$  ansteigt. Die Temperaturgrenze am Eintritt des Reformers liegt jedoch bei  $600^\circ\text{C}$ . Die Wassereindüsung in der zweiten Phase wurde mittels dem *discrete phase* Modell modelliert. Durch die Simulationen stellte sich heraus, dass die Wassereindüsung am sinnvollsten in die Luftzuleitung integriert werden sollte. An diesem Punkt treten während des Betriebs die niedrigsten Temperaturen auf und die Düse lässt sich konstruktiv einfacher integrieren. Weiterhin steht für die Wärmeübertragung die gesamte Fläche des Wärmeübertragers zur Verfügung. Die Eindüsung des Wassers in einen Luftmassenstrom von  $14 \text{ kg/h}$  ist im Anhang für 30 % der maximalen Wassermenge von  $6,7 \text{ kg/h}$  dargestellt. Durch die Zugabe von Wasser wird die Temperatur gesenkt, sodass bei einer Wassermenge von 42 % der maximalen Wassermenge die Temperaturgrenze von  $600^\circ\text{C}$  erreicht wird. Für diesen adiabaten Fall wäre eine Wasserzugabe von 42 % sinnvoll, um die Aufheizzeit zu beschleunigen. Der Druckverlust beträgt in dieser Phase maximal 20 mbar auf der Abgasseite und 34 mbar auf der Luftseite. Mit zunehmender Wassereindüsung sinkt der Druckverlust durch die sinkende Temperatur und den dadurch sinkenden Volumenstrom ab.

### 7.2.1.2 Sensitivitätsanalyse des Startbrennerbetriebs

Die durchgeführten Simulationen weisen darauf hin, dass der Startvorgang mit dem Startbrenner und dem entwickelten Wärmeübertrager realisiert werden kann. Basierend auf diesen Ergebnissen wurden erneut Versuche mit dem Startbrenner durchgeführt. Für diesen Zweck wurde ein Verbindungsflansch für den Startbrenner gefertigt. Der Gegendruck wurde durch ein im Flansch eingebautes Lochblech erhöht, sodass der Startbrenner auch bei einem Gegendruck getestet werden konnte. Die gemessenen Abgastemperaturen lagen bei den Versuchen oberhalb der berechneten adiabaten Verbrennungstemperaturen. Aus diesem Grund wurde der Verdichter des Startbrenners zusammen mit dem Startbrenner strömungstechnisch vermessen. Die Kennlinie des Startbrenner-Verdichters ist in Abbildung 7.11 gezeigt. Die experimentell ermittelte Verdichterkennlinie liegt deutlich unterhalb der vom Hersteller angegebenen Kennlinie. Für einen gegebenen Gegendruck ist der Volumenstrom somit geringer, als vom Hersteller angegeben. Dies liegt daran, dass die maximale Drehzahl des Motors geringer ist, als die angegebene Drehzahl im Datenblatt. Weiterhin ist in diesem Diagramm die Kennlinie für den Druckverlust im Abgasnachbehandlungsmodul (ANB-Modul) eingezeichnet. Auf diese Kennlinie wurde ein Druckverlust von 20 mbar für den Wärmeübertrager addiert. Dieser Druckverlust wurde als

Auslegungskriterium festgelegt. Der Schnittpunkt zwischen der gemessenen Verdichterkennlinie und der Kennlinie für den Gesamtdruckverlust aus dem Abgasnachbehandlungsmodul und dem Wärmeübertrager wird als neuer Auslegungspunkt festgelegt.

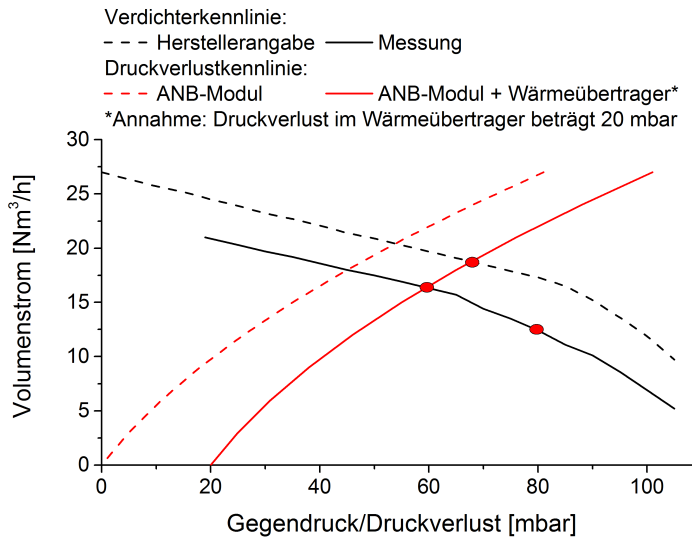


Abb. 7.11: Kennlinie des Startbrenner-Verdichters und Druckverlustkennlinie des Abgasstrangs

Am Auslegungspunkt beträgt der Volumenstrom der Verbrennungsluft  $16,3 \text{ Nm}^3/\text{h}$ . Ausgehend von diesem Punkt wurden die verschiedenen Aufheiz- und Startphasen erneut berechnet. Die Kraftstoffmenge für die Simulation wurde an die gemessene Kraftstoffmenge im Experiment angepasst. Die Temperatur und Druckverläufe sind für die Aufheizphase des Systems in Abbildung 7.12 für den Betrieb mit einer eingestellten Brennerleistung von 6 kW dargestellt. Der gemessene Dieselmassenstrom betrug bei dieser Leistungseinstellung 360 g/h.

Die Austrittstemperatur der Luft aus dem Wärmeübertrager übersteigt mit  $619^\circ\text{C}$  die geforderten  $600^\circ\text{C}$ . Die Austrittstemperatur des Abgases beträgt  $340^\circ\text{C}$ . Durch die Wärmeverluste beim Startbrenner werden diese Temperaturen im Systembetrieb jedoch weiter sinken. Der Druckverlust in den Rohren beträgt für diesen Fall 16 mbar und liegt damit unter der gesetzten Grenze von 20 mbar. Im Mantelraum beträgt der Druckverlust 28 mbar. Dieser Druckverlust ist im Vergleich zum restlichen System sehr gering und wirkt sich nur während des Startvorgangs aus. Der Wärmeübertrager erfüllt die Anforderungen für die Aufheizphase des Startvorgangs.



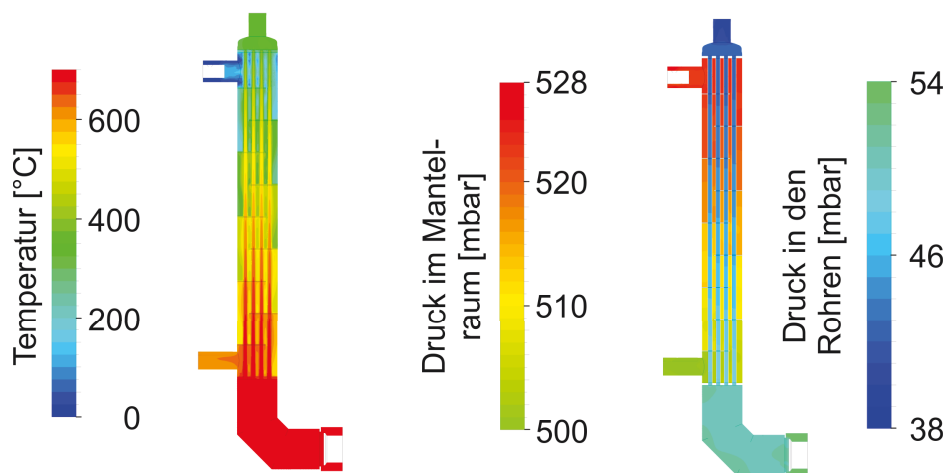


Abb. 7.12: Temperatur- und Druckverteilung im Wärmeübertrager während der Aufheizphase des Systems für eine eingestellte Startbrennerleistung von 6 kW

Die Lufttemperatur über der eingestellten Leistung ist auch in Abbildung 7.13 dargestellt. Neben dieser Berechnung am Auslegungszustand wurde eine Sensitivitätsanalyse hinsichtlich eines höheren Druckverlustes durchgeführt. Hierzu wurde ein Druckverlust von 80 mbar anstatt 60 mbar angenommen. Dieser Punkt wurde auch experimentell untersucht. Aufgrund der Temperaturgrenze von 900 °C kann der Startbrenner, bei dem Luftvolumenstrom von  $12,4 \text{ Nm}^3/\text{h}$ , nur mit einer Leistungseinstellung von 6 kW betrieben werden. Die adiabate Verbrennungstemperatur beträgt dann 891 °C. Bei einer Leistung von 7 kW beträgt die adiabate Temperatur schon 1009 °C und bei 8 kW 1116 °C. Die Austrittstemperatur der Luft beträgt für diese Fälle 727 °C, 826 °C und 918 °C. Die Eintrittstemperaturen in den Wärmeübertrager sinken im Experiment jedoch deutlich ab. So beträgt die Eintrittstemperatur bei der Einstellung von 6 kW am Startbrenner 700 °C. Die simulierte Austrittstemperatur der Luft liegt mit 570 °C unterhalb der Temperaturgrenze. Dadurch kann das System mit einer höheren Leistung betrieben werden. Ein höherer Druckverlust wirkt sich nicht so stark aus, wie durch die adiabate Verbrennungstemperatur befürchtet. Das System kann dadurch auch mit einem höheren Gegendruck für den Startbrenner, als er aufgrund der Vorversuche erwartet wird, betrieben werden. Übersteigt der Druckverlust jedoch den Wert von 80 mbar, dann muss das Gebläse des Startbrenners durch ein leistungsfähigeres Gebläse ausgetauscht werden.

In dem Diagramm sind weiterhin drei Betriebspunkte für die Zündphase der Systems dargestellt. Diese unterscheiden sich hinsichtlich der zugegebenen Medien. In dieser Phase werden die Luft- und Wassermengen entsprechend der Sauerstoff zu Kohlenstoff- und Wasser zu Kohlenstoff-Verhältnisse eingestellt. Diese Verhältnisse wurden entsprechend dem stationären Zustand zu  $\frac{n(\text{O}_2)}{n(\text{C})} = 0,47$  und  $\frac{n(\text{H}_2\text{O})}{n(\text{C})} = 1,9$  gewählt. Die Simulationen wurden mit der Leistung von 8 kW

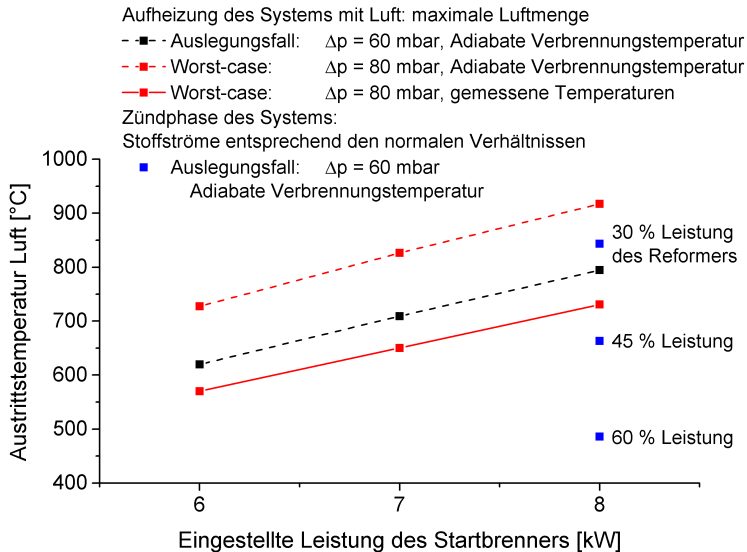


Abb. 7.13: Austrittstemperaturen der Luft aus dem Wärmeübertrager

durchgeführt. Diese Leistung ist die maximal mögliche Leistung, sodass bei dieser Leistung die Temperaturgrenze von 900 °C erreicht wird. Die Temperaturverläufe und die Tropfenverteilung für die drei betrachteten Betriebszustände sind in Abbildung 7.14 dargestellt. Die Stoffe wurden entsprechend ihrer normalen Zusammensetzung im stationären Zustand und der entsprechenden Leistung des Reformers eingestellt. Für die Leistung von 8 kW und die Annahme eines adiabaten Reaktors müsste der Reformer mit Stoffströmen, die über 45 % der maximalen Reformerleistung entsprechen, gestartet werden um die Temperaturgrenzen einzuhalten. Durch die Wärmeverluste ist es jedoch zu erwarten, dass die Temperaturen im Wärmeübertrager absinken. Durch die niedrigeren Temperaturen sinken die benötigten Stoffmengen um die Temperaturgrenze einzuhalten. Die Temperatur des Gemischs ist sehr gut über die zugegebenen Stoffmengen steuerbar. Aufgrund der eventuellen Abweichung der Temperaturen soll der optimale Betriebspunkt während der Startversuche des Systems ermittelt werden. Für einen Massenstrom von 4 kg/h entsprechend 60 % der maximalen Wassermenge umströmen die Wassertropfen das letzte Umlenkblech und verdampfen danach. Bei den anderen beiden Fällen tritt die vollständige Verdampfung schon wesentlich früher auf. Bei 3 kg/h ist das Wasser nach dem Sieben von 9 Umlenkbleichen verdampft und bei 2 kg/h bereits nach dem Vierten. Die Methodik zur Entwicklung des Wärmeübertragers mit Wassereindüsung muss noch experimentell validiert werden. Auf geringe Abweichungen kann systemtechnisch reagiert werden.

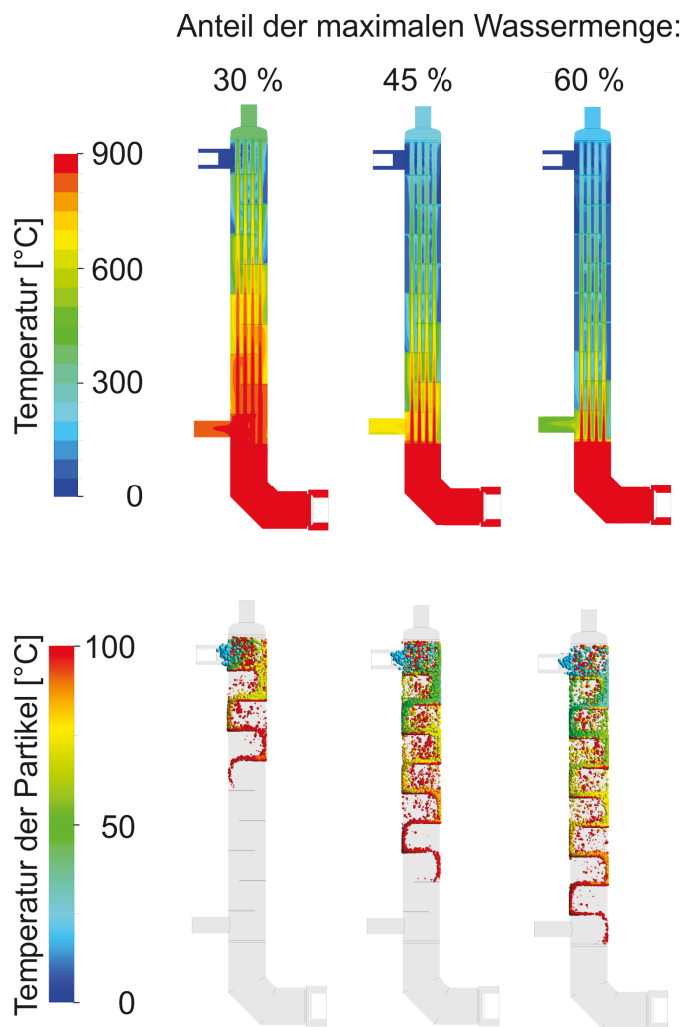


Abb. 7.14: Temperaturprofile und Verteilung der Tropfen im Wärmeübertrager für drei unterschiedliche Wassermengen in der Zündphase des Systems für eine eingestellte Startbrennerleistung von 8 kW

### 7.2.1.3 Experimentelle Untersuchung des Mikrostrukturwärmeübertragers

Neben dem für den Startvorgang benötigten Wärmeübertrager werden weitere Wärmeübertrager im System benötigt. Einer dieser Wärmeübertrager ist der Reformat-Luft Wärmeübertrager. In diesem wird das aus dem Wassergasshiftreaktor austretende Reformat auf eine Temperatur von 160 °C abgegekühlt und die Luft auf diese Temperatur aufgeheizt. Im Package 5 soll für diesen Zweck ein Mikrostrukturwärmeübertrager eingesetzt werden, der in einer Kooperation mit dem Institut für Mikrostrukturverfahrenstechnik des Karlsruher Instituts für Technologie entwickelt wurde. Dieser wurde vor dem Einsatz im System hinsichtlich seiner übertragenen Wärmeleistung und des zu erwarteten Druckverlusts untersucht. Die detaillierten Ergebnisse dieser Untersuchung sind im Anhang dargestellt. Der Mikrostruktur-Wärmeübertrager erreicht für den Auslegungsfall mit Reformat in Passage 1 die gewünschten Temperaturen im stationären Zustand. Der Druckverlust auf der Luftseite ist sehr niedrig, was zu einem guten Wirkungsgrad des Systems führt. Der Druckverlust auf der Reformatseite ist jedoch mit bis zu 230 mbar sehr hoch. Weiterhin hat der Wärmeübertrager eine hohe thermische Masse, sodass der Aufheizvorgang sehr lange dauert. Dieser Wärmeübertrager wird in Package 5 integriert. An dieser Stelle besteht jedoch noch ein Verbesserungspotential hinsichtlich des Druckverlustes und des Aufheizverhaltens.

### 7.2.1.4 Fazit Package 5

Die in dieser Arbeit entwickelte Methodik wurde zunächst zur Entwicklung von Package 5 eingesetzt. In dieses Package ist das in Kapitel 5 erarbeitete Startkonzept eingeflossen. Für diesen Startvorgang wird ein Wärmeübertrager benötigt, der zu Beginn des Startvorgangs Luft erwärmt und anschließend Wasser verdampft und überhitzt. Durch die entwickelte Methodik zur Vernetzung komplexer Geometrien konnte ein Wärmeübertrager dreidimensional vernetzt und berechnet werden. Dieser konnte zudem für den gegebenen Anwendungsfall optimiert werden. Weitere Vorversuche mit dem Startbrenner zeigten, dass dem Startbrenner weniger Verbrennungsluft zugegeben wird, als in der Verdichter Kennlinie gezeigt wird. Weiterhin treten bei den hohen Temperaturen im Startbrenner hohe Wärmeverluste auf, die zu einer deutlichen Temperaturreduzierung von etwa 200 K am Eintritt in den Wärmeübertrager führen. Der Wärmeübertrager wurde so entwickelt, dass er zuerst die Luft auf 600 °C aufheizt und das Abgas auf unter 400 °C abkühlt. Diese Bedingungen sind für eine am Startbrenner eingestellte Leistung von 6 kW erfüllt. Weiterhin muss Wasser für den Start des Systems verdampft und überhitzt werden. In einer adiabaten Rechnung müssen dem Reformer Stoffströme entsprechend einer Leistung oberhalb von 45 % des Volllastzustandes zugegeben werden, um die Temperaturgrenze mit einer Leistung von 8 kW einzuhalten. Bei diesem Betriebszustand gibt es mehrere Anpassungsmöglichkeiten. So kann einerseits die Leistung des Reformers bei der Zündung und die zugeführten Stoffwerte angepasst und andererseits die Leistung des Startbrenners im Bereich zwischen 6 kW und 8 kW angepasst werden. Durch die Entwicklung dieses maßgeschneiderten Wärmeübertragers konnten die beiden Bausteine, Startvorgang und Packaging, zusammen optimiert werden.

## 7.2.2 Package 6: Elektrisches Aufheizkonzept

Das Brenngaserzeugungspackage 6 basiert auf dem elektrischen Startkonzept. In diesem Package werden die Brenngaserzeugungskomponenten ATR 12, WGS 6 und KB 5 integriert. Der ATR 12 besitzt einen integrierten Heizdraht, um den elektrischen Startvorgang realisieren zu können. Beim Wassergasshiftreaktor WGS 6 und dem Katalytbrenner KB 5 handelt es sich um Neuentwicklungen. Der WGS 6 vereint beide Wassergasshiftstufen und den Wasserquench in einer Reaktorhülle. Der Katalytbrenner basiert auf dem KB 4. Er ist in Leichtbauweise ausgeführt und soll in der Lage sein, Reformat während der Startphase des Systems katalytisch umzusetzen. Beide Komponenten wurden strömungsdynamisch optimiert. Die Vorgehensweise wird am Beispiel des WGS 6 vorgestellt.

In den autothermen Reformer ATR 12 wurde ein elektrischer Heizdraht in dem integrierten Ringspaltwärmeübertrager eingebaut. Durch diesen Heizdraht soll das Wasser beim Start des Reformers verdampft und überhitzt werden. Die Ergebnisse eines Aufheizversuchs mit dem autothermen Reformer ATR 12 sind in Abbildung 7.15 gezeigt.

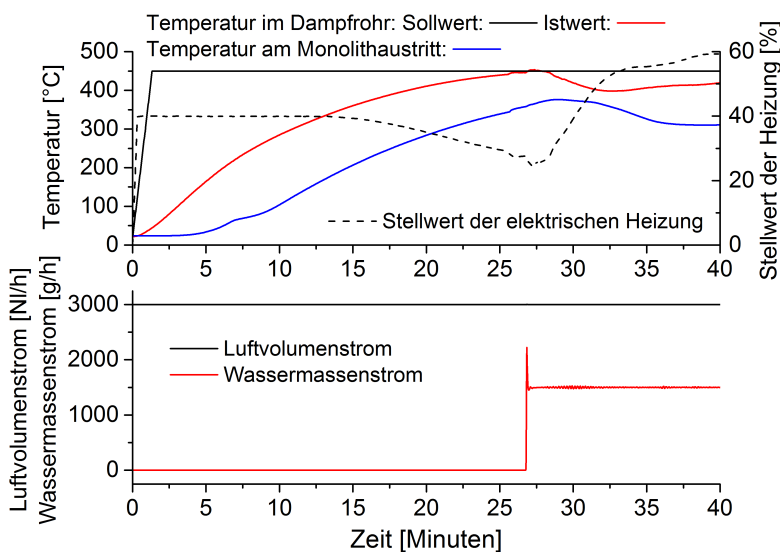


Abb. 7.15: Temperaturverläufe und zugegebene Stoffströme bei der Aufheizung des autothermen Reformers ATR 12 mit integrierter elektrischer Beheizung

Bei diesem Versuch wurden 3000 NI/h Luft mit Umgebungstemperatur durch den Dampfweg des Reformers geleitet. Die Luft wird während des Startvorgangs durch die integrierte Heizung erwärmt. Die Temperatur wird in einer Dampfsammelleitung hinter dem Wärmeübertrager gemessen und basierend darauf die Heizung geregelt. Die Solltemperatur wird in einer

Rampenfunktion von Umgebungstemperatur auf 450 °C erhöht. Die Stellgröße der Heizung steigt sehr schnell auf den maximalen Wert bei der Aufheizung mit Luft an, der auf 40 % eingestellt ist. Die Temperatur im Dampfrohr steigt durch die elektrische Beheizung an und die so erhitze Luft wärmt den Reformer auf. In diesem wird nach 25 Minuten eine Temperatur von 320 °C im Monolithen erreicht, sodass Wasser in den Dampfraum des Reformers eingedüst werden kann. Die Zufuhr von Wasser startet bei diesem Versuch nach 27 Minuten. Mit der Wasserzufuhr sinken die Temperatur im Dampfrohr und die Temperatur im Monolithen ab. Bei der Eindüsung von 1500 g/h Wasser sinkt die Temperatur auf bis zu 398 °C ab, bevor die Regelung der Heizung erfolgreich gegen die Temperaturabsenkung gegensteuert. Anschließend steigt die Dampftemperatur wieder an. Die Temperatur nach dem Monolithen fällt in dem durchgeführten Experiment auf bis zu 310 °C ab. Der Temperaturabfall geschieht innerhalb mehrerer Minuten, sodass der Reformer im Normalfall bereits gezündet wäre, bevor die Temperatur auf diesen Wert absinkt. Die benötigte Leistung, um die Temperatur von 450 °C zu halten sinkt im stationären Zustand weiter ab. Bei den eingestellten Stoffströmen von 3000 NI/h Luft und 1500 g/h Wasser ist eine Leistung von 1,86 kW notwendig, um das Wasser zu verdampfen und das Gemisch auf 450 °C zu erwärmen. Die Leistung, die sich aus einer Energiebilanz um den Reformer bestimmt wird, ergibt sich zu 1,34 kW. In dem integrierten Wärmeübertrager wird somit 0,52 kW des heißen austretenden Gemischs an die kalten eintretenden Stoffe übertragen. Die Stellgröße der Heizung betrug für diesen Fall 58 %. Durch die Experimente mit dem ATR 12 mit integriertem elektrischem Heizelement konnte das interne Verdampfungskonzept für den Startvorgang des Systems überprüft werden. Dieses ermöglicht die Wasserverdampfung während des Startvorgangs im Reformer. Weiterhin kann alleine durch das integrierte Heizelement der Reformer aufgeheizt werden und die benötigte Energie für die Wasserverdampfung bereitgestellt werden. Bei diesem Reformer kann somit auf externe Startkomponenten verzichtet werden. Die interne Beheizung wirkt sich somit stark positiv auf den Startvorgang und das Packaging aus.

Für das neue Brenngaserzeugungspackage 6 wurde zudem ein neuer Wassergasshiftreaktor entwickelt. Der entwickelte Wassergasshiftreaktor basiert auf dem WGS 4. Das Volumen des Katalysatormonolithen wurde vom WGS 4 übernommen. Diese beträgt 0,3 l für den HTS und 0,7 l für den NTS. Der neue Wassergasshiftreaktor soll die beiden Shiftstufen in einem zylindrischen Mantel vereinen. Zwischen diesen beiden Stufen findet weiterhin eine Wassereindüsung statt, um das Reformat vor dem WGS runterzukühlen. Für eine kompakte Bauweise ist es sinnvoll, die beiden Reaktionszonen und die Wassereindüsung in einem zylindrischen Mantel zu vereinen. Der Hochtemperaturshiftreaktor wird bei diesem Aufbau aus verschiedenen Gründen in der Mitte des Zylinders platziert. Die höchsten Temperaturen treten, mit bis zu 450 °C, in der HTS-Stufe auf. Weil dieser in der Mitte platziert wird, treten Wärmeströme an die umgebenden Bereiche auf und dadurch können die Wärmeverluste an die Umgebung reduziert werden. Weiterhin muss die Strömung am Eintritt des HTS ausgehend von der Zuleitung aufgeweitet und gleichmäßig verteilt werden. Dies ist besonders aufgrund der höheren Strömungsgeschwindigkeiten im HTS notwendig. Die Homogenisierung ist bei dem zentralen Einbau durch ein Verteilblech am Eintritt des Reaktors möglich. Der Monolith dieses Reaktors weist weiterhin aufgrund der höheren Reaktionsgeschwindigkeit das geringere Volumen auf.

Eine Anordnung des HTS im äußeren Bereich würde zu sehr engen Spalten führen, bei denen es schwierig wäre die Strömung zu homogenisieren. Nach dem Austritt des Reformats aus dem HTS findet eine Wassereindüsung statt. Das Wasser wird von oben auf ein Prallblech aufgedüst, während das Reformat von unten gegen dieses Blech strömt. In einem Ringspalt, der den HTS umgibt, wird das Reformat mit dem Wasser gemischt. Um die Verdampfung des Wassers sicherzustellen, wird in diesem Bereich ein poröser Körper in Form eines Drahtgestricks eingebaut. Um diesen Ringspalt schließt sich der NTS an. Dieser wird von unten nach oben durchströmt, sodass das Reformat oben austritt.

Dieses Konzept wurde durch strömungsdynamische Simulationen optimiert. Als Randbedingungen wurde von einem Reformatmassenstrom von 0,0067025 kg/s mit einer Temperatur von 400 °C ausgegangen. Dies entspricht einem Betrieb des Reformers mit einem Kraftstoffmassenstrom von 3037,5 g/h Diesel. Das Reformat setzt sich in diesem Punkt aus 29,41 %  $H_2$ , 22,43 %  $H_2O$ , 9,74 %  $CO_2$  und 7,49 %  $CO$ , 1 %  $CH_4$  und Stickstoff zusammen. Die eingedüste Wassermenge beträgt für den betrachteten Fall 0,000579 kg/s. Die ablaufenden Reaktionen wurden in diesem Reaktor basierend auf experimentellen Werten vorgegeben. Unter der Annahme eines linearen Reaktionsverlaufs wurden Quellen und Senkenterme für die Reaktion vorgegeben. An den WGS werden verschiedene Anforderungen gestellt. Der Kohlenmonoxidanteil soll auf 1 % reduziert werden. Um dieses Ziel bei einer kompakten Bauweise zu erreichen, ist eine gleichmäßige Strömungsverteilung notwendig, sodass der gesamte Katalysator ausgenutzt werden kann. Das eingedüste Wasser darf nicht in den HTS gelangen und muss verdampft werden, bevor es in die NTS-Stufe gelangt. Für einen hohen Systemwirkungsgrad sollte der Druckverlust des Systems möglichst gering sein. Weiterhin sollte der WGS leicht und günstig zu fertigen sein.

Der Temperatur- und Druckverlauf im WGS 6 ist für den Auslegungszustand in Abbildung 7.16 dargestellt. Das Reformat strömt von unten in den HTS. Um eine möglichst homogene Geschwindigkeitsverteilung über den Querschnitt zu erreichen, wird die Strömung am Eintritt der Stufe durch eine Blech umgelenkt und verteilt. Im Monolithen findet aufgrund der exothermen Reaktion eine Temperaturerhöhung statt. Das heiße Reformat strömt gegen ein Prallblech, wird zur Seite umgelenkt und in einem Ringspalt nach unten geführt. Die Wassertropfen verdampfen teilweise direkt auf dem Blech und die restlichen Wassertropfen verdampfen im Spalt zwischen dem HTS und dem NTS. Durch die Vermischung mit Wasser wird das Reformat von etwa 450 °C auf 305 °C abgekühlt. Im NTS findet eine erneute Temperaturerhöhung auf 325 °C statt. Der Druckverlust im gesamten Reaktor beträgt in etwa 40 mbar. Dies ist eine deutliche Verbesserung zum WGS 4, bei dem der Druckverlust in etwa 300 mbar betrug. Der Druckverlust im WGS ist zu jeweils einem Drittel auf den HTS, den Ringspalt und den NTS verteilt.

Der Verlauf der Kohlenmonoxidkonzentration und der eingedüsten Wasserpartikel sind in Abbildung 7.17 dargestellt. Der Kohlenmonoxidanteil wird in dem HTS auf 3,1 Vol-% reduziert. Durch die Verdünnung des Reformats mit Wasserdampf wird der Kohlenmonoxidanteil auf 2,8 Vol-% vor dem NTS und auf 1 Vol-% im NTS reduziert. Die Kohlenmonoxidkonzentration

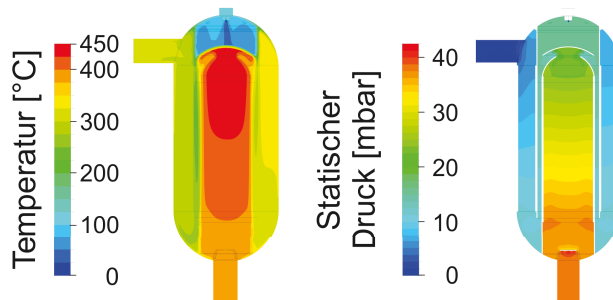


Abb. 7.16: Temperatur- und Druckverlauf im Wassergasshiftreaktor WGS 6

ist im HTS in radialer Richtung nahezu konstant. Die Konzentration ist im äußeren Bereich am höchsten, da in diesem Bereich durch das Umlenklech die höchsten Geschwindigkeiten auftreten. Im NTS kommt es zu einer stärkeren Ungleichverteilung aufgrund des an einer Seite angeordneten Auslasses. Die Gleichverteilung im NTS ist jedoch in diesem Zustand akzeptabel. Eine gleichmäßigere Strömungsverteilung ist nur mit einem höheren Druckverlust zu gewährleisten. Die entwickelte Lösung stellt einen guten Kompromiss zwischen einer Gleichverteilung und einem geringen Druckverlust dar. Zwischen den beiden Shiftstufen wird Wasser in den Reaktor eingedüst. Die Verteilung der eingedüsten Partikel ist in Abbildung 7.17 rechts dargestellt. Im Bereich der Wassereindüsung kommt es zu starken Verwirbelungen des Wassers, wodurch es zu einer Ansammlung der Wasserpartikel in diesem Bereich kommt. Die Wassertropfen werden durch die Strömung des Reformats durch den Ringspalt transportiert. Sie können nicht in den HTS gelangen und werden, bevor sie in den NTS gelangen, verdampft. Durch die Rezirkulation im Eindüsbereich haben die Partikel bereits bei dem Eintritt in den Ringspalt eine Temperatur von 100 °C.

Das Volumen des Reaktors ohne Isolierung konnte vom WGS 4 mit 3,1 l auf 2 l beim WGS 6 reduziert werden. Bei dieser Berechnung wurde die Isolierung nicht berücksichtigt. Der WGS 6 kann platzsparender isoliert werden, da nur ein Reaktor isoliert werden muss. Ein Vergleich zwischen WGS 4 und WGS 6 in verschiedenen Ansichten ist im Anhang dargestellt. Eine der Optimierungsaufgaben beim Katalytbrenner 5 war die kompaktere und leichtere Bauweise. Verschiedene Ansichten des neu entwickelten Katalytbrenners 5 sind ebenfalls im Anhang dargestellt. Das Volumen des Katalytbrenners reduziert sich von 9 l beim KB 3 auf 4 l beim KB 5.

## 7.3 Fazit des Packagings

In diesem Kapitel wurde eine Methodik zur Packageentwicklung basierend auf strömungsdynamischen Simulationen erarbeitet. Eine Vernetzungsmethode basierend auf der Interface-Vernetzung führte zu einer Reduzierung der Rechenzeit um 92 %. Durch diese Reduzierung



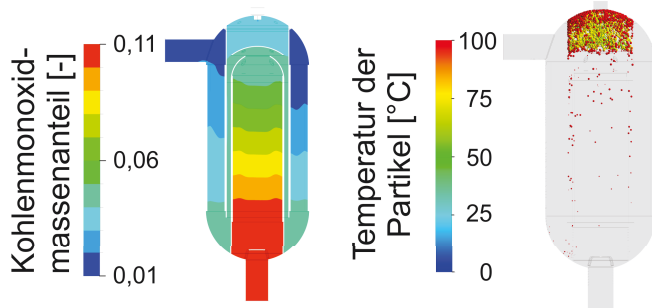


Abb. 7.17: Kohlenmonoxidkonzentration (links) und eingedüste Wasserpartikel (rechts) im Wassergasshiftreaktor WGS 6

der Rechenzeit ist die erarbeitete CFD-Methodik für die Anwendung zur Optimierung eines Packages anwendbar.

Weiterhin wurde eine Methodik zur Entwicklung von maßgeschneiderten Wärmeübertragern erarbeitet. Mit dieser Methodik wurden zwei Wärmeübertrager für die Luftvorwärmung des Reformers entwickelt. Der Vergleich der simulierten und experimentell ermittelten Temperaturen führte zu einer Temperaturabweichung von weniger als 5 K im Auslegungszustand. Diese Temperaturabweichung entspricht einem Wärmeverlust von 25 W im Experiment. Diese Methode wurde in einem weiteren Schritt angewendet, um einen Wärmeübertrager für den Startvorgang des Systems zu entwickeln. Dieser Wärmeübertrager ist auf die Bedürfnisse des Systems und des existierenden Startbrenners abgestimmt. Mit diesem Wärmeübertrager kann der in Kapitel 5 erarbeitete Startvorgang umgesetzt werden. Für den Betrieb des Startbrenners im Package wurde eine Sensitivitätsanalyse hinsichtlich des Gegendrucks des Startbrenners durchgeführt. Diese zeigte, dass das System auch mit einem erhöhten Gegendruck von 80 mbar im Vergleich zu den ermittelten 60 mbar noch startfähig ist. Sowohl bei der Aufheizung mit Luft, als auch in der Zündphase des Reformers können die Temperaturgrenzen des Systems eingehalten werden.

Für den elektrischen Startvorgang des Systems wurde ein elektrisches Heizelement in den Reformer integriert. Das elektrische Aufheizkonzept konnte durch Versuche mit diesem Reformer validiert werden. Es ist sowohl möglich, den Reformer innerhalb von 25 Minuten durch dieses Element aufzuheizen, als auch das Wasser während des Startvorgangs im Reformer zu verdampfen. In diesem Kapitel wurde weiterhin die Entwicklung und Optimierung von einem neuen Wassergasshiftreaktor beschrieben. Der Wassergasshiftreaktor basiert auf einer zylindrischen Bauweise mit einer integrierten Wassereindüsung. Durch diese Bauform kann das Volumen des Reaktors deutlich reduziert werden. Der Katalytbrenner konnte ebenfalls hinsichtlich seiner Abmessungen hin optimiert werden. Diese Brenngaserzeugungskomponenten sollen in einem Brenngaserzeugungspackage basierend auf der elektrischen Aufheizung Anwendung finden.

Die entwickelte Packagemethodik wurde zur Entwicklung von Komponenten für zwei neuen Packagegenerationen eingesetzt. Diese Methodik fließt in die Gesamtmethodik im nächsten Kapitel ein. Es werden zwei neue Packagekonzepte dargestellt, die mit Hilfe der in dieser Arbeit entwickelten Gesamtmethodik entwickelt wurden.



## 8 Anwendung der Gesamtmethodik

Das Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung einer Methodik zur Weiterentwicklung eines HT-PEFC-Systems mit Dieselreformierung hinsichtlich der Anforderungen einer mobilen Anwendung für die Bordstromversorgung. Hierzu wurden zu Beginn der Arbeit die drei Themengebiete Startvorgang, Hybridisierung und Packaging identifiziert. Diese drei Bereiche wurden im Rahmen dieser Arbeit bearbeitet und optimiert. Durch eine Literaturrecherche wurde der Stand der Technik beleuchtet und es wurden die Arbeitsschwerpunkte dieser Arbeit abgeleitet. Für die Optimierung des Systems wurden verschiedene Modellierungswerkzeuge verwendet und Experimente durchgeführt.

In einer Literaturrecherche wurde der Stand der Technik in den drei Themenfeldern erarbeitet. Der Startvorgang eines Brenngaserzeugungssystems wird in der Literatur durch eine elektrische Beheizung oder eine Verbrennung des Kraftstoffs realisiert. Die Aufheizung durch die Verbrennung von Kraftstoff kann mit einem Startbrenner realisiert werden. Die indirekte Aufheizung mittels in einem Wärmeübertrager erwärmter Luft verhindert die Ablagerung von Kohlenstoff im System. Die in der Literatur oft verwendete elektrische Aufheizung eines kleinen Bereiches und anschließende Initiierung einer Verbrennungsreaktion kann in dem vorliegenden System nicht angewendet werden, da Wasserdampf zur Verdampfung des Kraftstoffs benötigt wird. Aus diesem Grund kommt neben der indirekten Aufheizung mittels Startbrenner nur eine elektrische Aufheizung des gesamten Brenngaserzeugungssystems, bis das System zündbereit ist, in Frage. Bei der Hybridisierung ergab sich, dass bei einer passiven Hybridverschaltung der Systemaufbau des Hybridsystems entscheidend ist. Durch den geeigneten Systemaufbau lässt sich bei diesem Konzept die Leistungsaufteilung innerhalb gewisser Grenzen einstellen. Bei der aktiven Hybridverschaltung kann durch einen Spannungswandler jeweils eine Komponente entkoppelt werden, die dann unabhängig dimensioniert und betrieben werden kann. Für den aktiven Hybrid ist die Betriebsstrategie von entscheidender Bedeutung. Beim Packaging ist ein zylindrisches Konzept für die kompakte Bauweise des Systems besonders vorteilhaft. Zu den in der Literatur vorhandenen zylindrischen Packages gibt es jedoch keine experimentellen Daten zur Validierung der vorgestellten Konzepte. Bei der Entwicklung eines solchen Packages treten starke Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Komponenten auf. Aus diesem Grund ist es notwendig, ein solches Package dreidimensional berechnen und optimieren zu können.

Basierend auf den Erkenntnissen aus der Literaturrecherche wurde ein methodischer Ansatz entwickelt. Die drei Themengebiete Startvorgang, Hybridisierung und Packaging wurden in diesem Ansatz stark miteinander vernetzt betrachtet. Als Methodik wurden thermodynamische Berechnungen angewendet, um entwickelte Konzepte zu überprüfen. Diese wurden in einem zweiten Schritt durch dynamische Systemsimulationen unterstützt. Diese Systemsimulationen wurden sowohl für den Startvorgang, als auch für die Hybridisierung des Systems angewendet. Die beiden Modelle ergänzen sich zu einem Gesamtsystemmodell des Hybridsystems. Im

Rahmen des Packagings wurden weiterhin strömungsdynamische Simulationen durchgeführt. Diese bauen auf den bisher am IEK-3 durchgeführten Arbeiten auf. Die verwendeten Modelle wurden hinsichtlich der dynamischen Simulation der Aufheizvorgänge und der Simulation eines Packages erweitert. Die strömungsdynamischen Simulationen wurden zur Reduzierung der Rechenzeit parallelisiert durchgeführt. Unterstützt wurde die Simulationsmethodik durch Experimente mit dem Gesamtsystem und verschiedenen Einzelkomponenten. Durch diese Experimente konnten die Randbedingungen für die Simulationen gesetzt werden und die Methodik konnte überprüft werden.

Bei der Entwicklung des Startkonzeptes wurden sowohl ein thermisches als auch ein elektrisches Konzept entwickelt. Das thermische Konzept basiert auf der Verwendung eines Startbrenners und der Übertragung der freigesetzten Wärme in einem ersten Wärmeübertrager an Luft zur Aufheizung des Brenngaserzeugungssystems und in einem zweiten Wärmeübertrager an das Wärmeträgeröl der Brennstoffzelle. Für dieses Konzept wurde der in einer vorherigen Arbeit ausgewählte Startbrenner verwendet. Simulationen haben gezeigt, dass für einen energieeffizienten Startvorgang die Brennstoffzelle zuerst aufgeheizt und das Brenngaserzeugungssystem erst danach gestartet werden sollte. Weiterhin wurde ein elektrisches Startkonzept entwickelt. Bei diesem Konzept wird zuerst Luft erwärmt, um das System aufzuheizen. Für den Startvorgang muss Wasser innerhalb des Reformers verdampft werden. Für diesen Zweck wurde eine elektrische Heizung in den Reformer ATR 12 integriert, sodass der Reformer mit 20 % seiner Leistung startfähig ist. Nach der Zündung des Reformers wird die im Katalytbrenner durch die Oxidation des Reformats freiwerdende Wärme zur Aufheizung der Brennstoffzelle genutzt. Die simulierte Aufheizzeit für diesen Startvorgang war mit 30 Minuten, 14 Minuten kürzer als die Startzeit des thermischen Startvorgangs. Die benötigte Energie für den Startvorgang war mit 0,34 kWh elektrischer und 2,9 kWh thermischer Energie geringfügig höher als beim thermischen Startvorgang. Der hohe thermische Energiebedarf ist auf den Betrieb des Brenngaserzeugungssystems zur Aufwärmung der Brennstoffzelle zurückzuführen.

Weiterhin wurde der Startvorgang auch durch zweidimensionale strömungsmechanische Simulationen modelliert. Hierzu wurden verschiedene Ansätze für die Modellierung des porösen Körpers mit experimentellen Aufheizkurven verglichen. Die Verwendung des Einzonenmodells führte zu einer Abweichung der Aufheizzeit von 97 Sekunden bei 12000 NI/h Luft und 192 Sekunden bei 6000 NI/h Luft bis die Monolithtemperatur von 120 °C erreicht war. Die prozentualen Abweichungen liegen bei 47 % beziehungsweise 56 %. Die Verwendung des Zweizonenmodells führt für die gleichen Simulationsrandbedingungen zu einer Abweichung von 3 Sekunden bei 12000 NI/h Luft und 5 Sekunden bei 6000 NI/h Luft. Die prozentuale Abweichung beträgt in beiden Fällen lediglich 1,5 % bezogen auf die experimentell ermittelte Zeit. Für die dynamische Simulation des Gesamtsystems wurde eine Methodik zur Kopplung der einzelnen Reaktoren in einer zweidimensionalen Simulation entwickelt. Durch diese Methodik konnte das strömungsdynamische Modell auf eine Gesamtsimulation der Brenngaserzeugungskomponenten erweitert werden. Mit diesem Modell konnten dann die Einflussfaktoren auf den Aufheizvorgang detailliert untersucht werden. Eine Aufheizung der Komponenten mit einer höheren Leistung wirkt sich vorteilhaft aus, da weniger Wärme an die Isolierung abgegeben

---

wird. Bei der Verwendung des Reformers ATR 9.2 ist bei einer Aufheizung des Systems der Katalytbrenner die limitierende Komponente. Bei einer Aufheizleistung von 2 kW und einer Eintrittstemperatur von 600 °C beträgt die Aufheizzeit 28 Minuten und bei 500 °C 24 Minuten. Bei der Verwendung des Reformers ATR 12 ist der Monolith im Reformer die limitierende Komponente. Bis dieser auf 320 °C aufgeheizt ist, dauert es mit einer Eintrittstemperatur von 600 °C und einer Aufheizung durch den Dampfweg 22 Minuten und mit 500 °C 24 Minuten. Die Leistung wurde in diesen Fällen immer konstant zu 2 kW gewählt. Für die Packagevariante mit dem ATR 12 wurden weiterhin verschiedene Einflussparameter untersucht. Die Aufheizzeit des Katalytbrenners kann durch eine zusätzliche Beheizung mit einer Leistung von 0,5 kW so beschleunigt werden, dass der Katalytbrenner nicht mehr die letzte Komponente ist, die den Taupunkt erreicht. Eine Aufheizung ab diesem Punkt mit Wasserdampf und einer Leistung von 2 kW führt zu einer Verzögerung der Aufheizung. Die Aufheizzeit kann durch eine Erhöhung der Leistung geringfügig beschleunigt werden, was jedoch energetisch nachteilig ist. Bei dem vorteilhaftesten Startvorgang wird der Reformer parallel mit Luft, die in den Luft- und den Dampfweg zugegeben wird, mit einer Leistung von jeweils 1 kW aufgeheizt. Zusätzlich wurde dem Katalytbrenner Luft mit einer Leistung von 0,5 kW zugegeben. Durch diesen Vorgang konnte der Startvorgang des Brenngaserzeugungssystems in den zweidimensionalen Simulationen von 22 Minuten im Basisfall auf 9,5 Minuten reduziert werden.

Bei der Hybridisierung wurden passive und aktive Konzepte untersucht. Bei einer Verschaltung zum passiven Hybrid wurde die Brennstoffzellenspannung bei der gewünschten Leistung auf die offene Zellspannung der Batterie dimensioniert. Dieses Konzept führte zu einer sehr geringen Anpassung der Brennstoffzellenleistung zwischen 1667 W und 1968 W im Betrieb. Diese Änderung ist auf die Spannungsänderung der Batterie bei einer Änderung des Ladezustandes zurückzuführen. Die Batterie muss durch die geringe Änderung der Brennstoffzellenleistung bei diesem Konzept mit mindestens 15 parallelen Zellen groß dimensioniert werden. Ein Konzept, bei dem die Brennstoffzelle den Leistungsbedarf bis zu einer gewissen Grenze komplett abdeckt, wird aufgrund der hohen dynamischen Beanspruchung der Brennstoffzelle ausgeschlossen. Beim aktiven Hybrid wurden verschiedene Betriebsstrategien untersucht. Der Betrieb der Brennstoffzelle bei einer konstanten Leistung führte zum besten Systemwirkungsgrad von 29,3 %, aber mit 15 parallelen Zellen auch zur größten Batterie. Durch einen dynamischen Betrieb des Brenngaserzeugungssystems kann die Batteriegröße um bis zu 87 % reduziert werden. Die kleinste Batterie mit nur 2 parallelen Zellen wird für einen dynamischen Betrieb des Brenngaserzeugungssystems zusammen mit einer Absenkung des Brennstoffnutzungsgrades bei sehr kleinen Leistungsanforderungen erreicht. Der Wirkungsgrad sinkt für diesen Fall auf 26,1 % ab. Weiterhin wurde der Einfluss des Startvorgangs auf die Hybridisierung untersucht. Die Berücksichtigung des Startvorgangs führt zu einer größeren Batterie. Der Wirkungsgrad des Systems fällt bei der Berücksichtigung des Startvorgangs auf bis zu 25,3 % ab. Es wurde gezeigt, dass das System möglichst bevor ein Leistungsbedarf anfällt gestartet werden sollte und das dies wenn möglich durch die Abwärme des Lastkraftwagens geschehen sollte. Durch den vorgezogenen Startvorgang steigt der Wirkungsgrad auf bis zu 26,2 % an. Die Verwendung von Abwärme für die Aufheizung der Brennstoffzelle erhöht den Wirkungsgrad auf 28,1 %. Bei einem Betrieb der APU für ein Leistungsbedarfsprofil mit längeren Pausen sollte das Brenn-

stoffzellensystem auch für kürzere Pausen gestartet werden, um die Batteriegröße um bis zu 50 % reduzieren zu können. Der Startvorgang sollte für dieses System möglichst effizient sein, da er sich direkt auf den Wirkungsgrad des Systems auswirkt.

Im Rahmen des Packagings wurde eine Simulationsmethodik für die Modellierung des gesamten Brenngaserzeugungspackages entwickelt. Für die Erstellung des Rechengitters wurden verschiedene Methoden hinsichtlich ihrer Eignung für die Simulation untersucht und verglichen. Für den Reformer ATR 9.2 wurde ein hybrides Rechnetz mit ausschließlich konformer Grenzflächenvernetzung und eins mit überwiegend konformer Grenzflächenvernetzung aber mit vereinzelter Verwendung von Interfaces angewandt. Durch die Verwendung der Interfaces konnte die Netzgröße auf beiden Seiten des Interfaces unabhängig voneinander gewählt werden. An den Interfaces wurden für die benachbarten Oberflächen konforme Grenzflächen erstellt. Diese wurden jedoch durch eine Duplizierung der Geometrie unabhängig voneinander vernetzt. Anschließend wurden diese Flächen im Löser manuell zugeordnet. Die Verwendung dieser Interface-Vernetzung führte durch die unabhängige Wahl der Vernetzungsgrößen zu einer Reduzierung der Zellanzahl und der Rechenzeit. Die Zellanzahl konnte beim Reformer ATR 9.2 für unterschiedliche Netzgrößen von 34,5 Millionen auf 6,4 Millionen bzw. 2,9 Millionen Zellen reduziert werden. Die Rechenzeiterparnis ergab sich zu 86 % bzw. 92 %. Die Ergebnisse der Simulation waren für beide Vernetzungsmethoden sehr ähnlich. Durch diese neue Vernetzungsmethode wurde die akademische Methode auf eine zur Optimierung anwendbare Methodik überführt. Mit der Vernetzungsmethode der Interface-Vernetzung wurde anschließend der Reformer ATR 9.2 zusammen mit dem WGS 4 berechnet.

Bei der Packageentwicklung ist weiterhin die genaue Auslegung der Wärmeübertrager von entscheidender Bedeutung, um die gewünschten Temperaturniveaus einzuhalten. Im Rahmen dieser Arbeit wurden Wärmeübertrager für die Luftvorheizung des Reformers entwickelt. Die Auslegung durch die strömungsdynamischen Simulationen wurde anschließend durch experimentelle Untersuchungen der Wärmeübertrager überprüft. Im Auslegungszustand des Wärmeübertragers liegen die experimentellen Werte der Austrittstemperaturen lediglich bis zu 5 K unterhalb der simulierten Werte. Dieser Temperaturunterschied entspricht einem Wärmeverlust des Versuchsaufbaus von 25 W. Durch verschiedene Betriebszustände konnte eine Abhängigkeit der Wärmeverluste vom Betriebszustand gezeigt werden. Weiterhin wurde auch ein Aufheizversuch mit dem Wärmeübertrager durchgeführt. Die Eintrittstemperaturen des Wärmeübertragers wurden als dynamische Randbedingungen für die dynamischen CFD-Simulationen gewählt. Der Verlauf der simulierten Austrittstemperaturen stimmt sehr gut mit den experimentell ermittelten Verläufen überein, wobei in diesem Fall auch ein Temperaturunterschied durch den Wärmeverlust auftritt. Diese Methodik wurde zur Entwicklung eines Wärmeübertragers für den Startvorgang eingesetzt. Dieser wurde passend zu dem bestehenden Startbrenner und den Anforderungen des Systems entwickelt. Vortests des Startbrennerbetriebs bei Gegendruck zeigten, dass die Luftmenge des Gebläses kleiner ist, als in der Herstellerkennlinie angegeben. Die bestehende Infrastruktur der Abgasnachbehandlung wurde auf den entstehenden Druckverlust hin untersucht. Die Simulation des Wärmeübertragers wurde auf den ermittelten Gegendruck von 40 mbar im Abgasnachbehandlungsmodul hin abgestimmt. Weiterhin wurde der Einfluss

einer Erhöhung des Gegendrucks auf einen Wert von 80 mbar untersucht. Durch den höheren Gegendruck sinkt der Verbrennungsluftstrom des Startbrenners ab und die Temperatur im Abgas steigt. Durch die Wärmeverluste im Startbrenner werden die Temperaturgrenzen der Bauteile jedoch weiterhin eingehalten. Ein geringfügig höherer Druckverlust ist für den Betrieb des Startbrenners unkritisch. Somit kann der Startbrenner zusammen mit dem neuen Wärmeübertrager in das nächste Package integriert werden.

## 8.1 Zusammenführung der Ergebnisse

Basierend auf den Simulationsergebnissen des thermischen Startvorgangs wurde das Brenngaserzeugungspackage 5 konstruiert. Dieses ist in Abbildung 8.1 dargestellt. Die Abmaße der äußeren Isolierung betragen bei diesem Package 444 mm Breite, 300 mm Tiefe und 585 mm Höhe. Somit beträgt das Volumen des Packages 77,9 l. Der Startbrenner wird bei diesem Konzept zur Senkung des Druckverlustes direkt an den Wärmeübertrager angeflanscht. Der Startbrenner-Wärmeübertrager ist direkt neben dem Reformer angeordnet, um die Rohrlänge der Leitungen zu minimieren. Das Reformat strömt vom ATR in den daneben angeordneten Wassergasshiftreaktor und anschließend durch den getesteten Mikrostruktur-Wärmeübertrager. Danach gelangt das Reformat zur Brennstoffzelle und das nicht umgewandelte Reformat (Anodenrestgas) wird im Katalytbrenner vollständig oxidiert. Die Reaktionswärme wird zur Erzeugung des für den Reformer benötigten Wasserdampfes verwendet. Sobald der Wasserdampf durch den Katalytbrenner bereitgestellt wird, kann der Startbrenner ausgeschaltet werden.

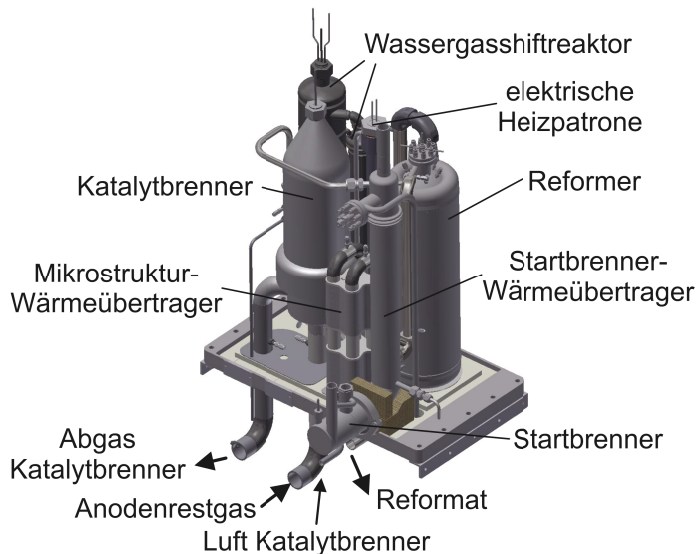


Abb. 8.1: Aufbau des Brenngaserzeugungspackages 5 mit einer Leistungsklasse von  $10 \text{ kW}_{el}$



Der für den elektrischen Startvorgang benötigte ATR 12 mit dem integrierten elektrischen Heizelement wurde experimentell untersucht. Bei einer Aufheizung des Reformers mit 40 % der Nennleistung des integrierten Heizelements konnte der Reformer innerhalb von 25 Minuten auf die für die Zündung benötigten Temperaturen aufgeheizt werden. In diesen Experimenten konnte weiterhin das Konzept der internen Wasserverdampfung während des Startvorgangs validiert werden. Bei der Wassereindüsung in den Reformer sinkt die Temperatur im Dampfrohr des Reformers nur geringfügig ab. Bei der Wassereindüsung wirken sich sowohl die thermische Masse des Reformers, als auch die Wärmeübertragung von den austretenden Gasen an das eingedüste Wasser positiv aus. Durch dieses Konzept wird die im Wärmeübertrager vorhandene Fläche für die Verdampfung des Wasser ausgenutzt, so dass auf einen externen Verdampfer während des Startvorgangs verzichtet werden kann. Dies wirkt sich positiv auf das Volumen und das Gewicht des Packages aus. Die geringe thermische Masse des Heizdrahtes ist ebenfalls sehr vorteilhaft für einen schnellen Startvorgang des Systems. Der Reformer ATR 12 kann somit ohne eine zusätzliche externe Beheizung aufgeheizt und gezündet werden. Weiterhin wurde die integrierte Bauweise der Reaktoren am Beispiel des Wassergasshiftreaktors WGS 6 demonstriert.

Die Reaktoren ATR 12, WGS 6 und KB 5 werden für das auf dem elektrischen Startkonzept basierende Package verwendet. Eine Verschaltung der drei Komponenten ATR 12, WGS 6 und KB 5 zum Package 6 ist in Abbildung 8.2 in einer isometrischen Ansicht und in einer Draufsicht gezeigt. Diese Geometrie wurde als Ausgangspunkt für die strömungsdynamischen Simulationen mit dem Package 6 verwendet. In der Draufsicht des Packages ist eine abknickende Schnittebene eingezeichnet. Die Ergebnisse der Simulationen werden im Folgenden auf dieser Ebene dargestellt.

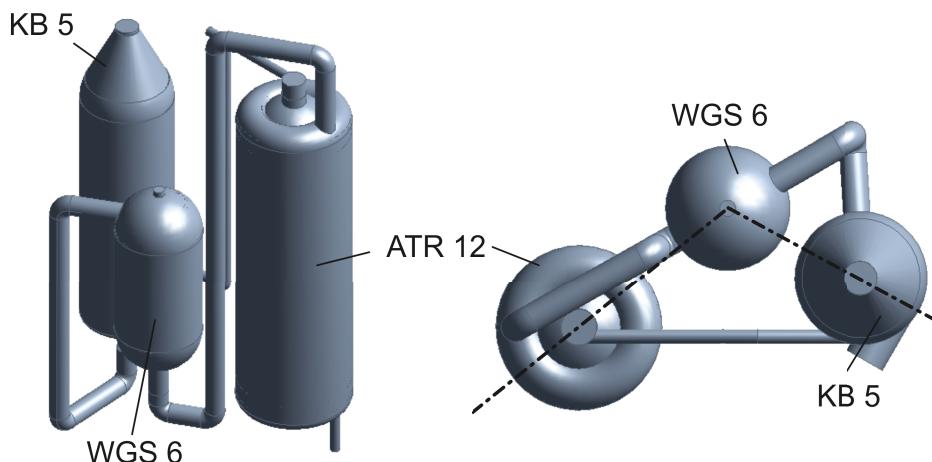


Abb. 8.2: Isometrische Ansicht des Brenngaserzeugungspackages 6 (links) und Draufsicht mit der Schnittdarstellung (rechts)

Für die transienten Aufheizsimulationen des Packages 6 wurde das im Rahmen der Anfahrstrategieentwicklung validierte Zweizonenmodell für die porösen Körper verwendet. Bei der Erzeugung des Rechengitters wurde die Methodik der Interface-Vernetzung mit den Vernetzungsparametern der Netzstudie angewandt. Mit dem so erstellten dreidimensionalen Gesamtmodell des Brenngaserzeugungssystems wurde der Aufheizvorgang des Packages untersucht. Bei der Simulation des Aufheizvorgangs wurden die Einstellungen für den in Kapitel 5 favorisierten parallelen Startvorgang verwendet. Das System wird bei diesem Aufheizvorgang durch 3 Stränge parallel aufgeheizt. Die Verläufe der Monolithtemperaturen während der Aufheizung sind in der Abbildung 8.3 gezeigt.

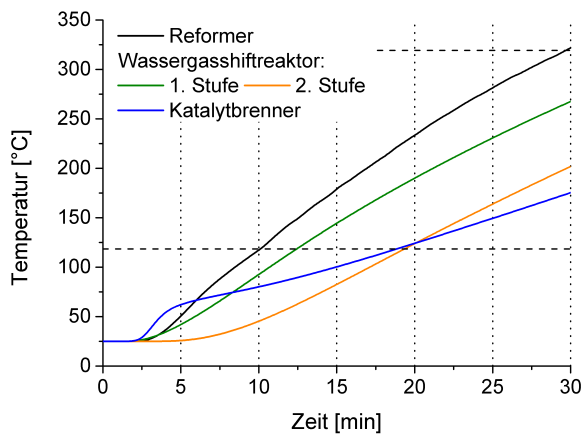


Abb. 8.3: Verläufe der Monolithaustrittstemperaturen während des Aufheizvorgangs im Package 6

Bei dieser Aufheizung ist nach 10 Minuten in dem Reformermonolith der Taupunkt überschritten. Auf den Monolithen des Reformers folgen der HTS-Monolith und der Monolith im Katalytbrenner. Zuletzt ist der Taupunkt im NTS-Monolithen nach 19 Minuten überschritten. Dieser Zeitverlauf spiegelt die Ergebnisse der zweidimensionalen Simulation wieder. Durch die Berücksichtigung der Ein- und Auslässe kommt es jedoch zu einer deutlichen Verzögerung des Aufheizvorgangs. Der Taupunkt ist in der dreidimensionalen Simulation erst nach 19 Minuten in allen Komponenten überschritten, im Vergleich zu den simulierten 9,5 Minuten in der zweidimensionalen Simulation. Der Reformer ist aufgrund der benötigten Temperatur von 320 °C im Monolithen erst nach 30 Minuten zündbereit. Die starke Abweichung zu den simulierten 9 Minuten aus der zweidimensionalen Simulation ist durch die starke Vereinfachung der Verbindungsrohre in der 2D-Simulation begründet.

Die Temperaturprofile entlang der in Abbildung 8.2 dargestellten Schnittebene, während des Aufheizvorgangs des Systems, sind in Abbildung 8.4 dargestellt. Es wird erhitzte Luft durch

den Luft- und den Dampfweg des Reformers und durch die Zuleitung zum Katalytbrenner zugegeben. Die dem Reformer nachgeschalteten Komponenten profitieren von der im integrierten Wärmeübertrager des Reformers übertragenen Wärme an die austretende Luft. Durch die Übertragung dieser Wärme gelangt die Luft deutlich abgekühlt in die Mischkammer. Die durch den Luftweg zugeführte Luft gelangt schon nach 5 Minuten mit 300 °C in den Luftkranz der Mischkammer. Die Strömung der Luft durch die dünnen Bohrungen in den Blechen und die Vermischung mit der kalten Luft kühlt die Luft aus dem Luftstrang jedoch sehr stark ab, sodass erst nach 15 Minuten 300 °C in der Mischkammer erreicht werden. Da der Katalytbrenner nur auf eine Temperatur von 120 °C aufgeheizt werden muss, wird die Leistung der zugeführten Luft mit 0,5 kW gewählt.

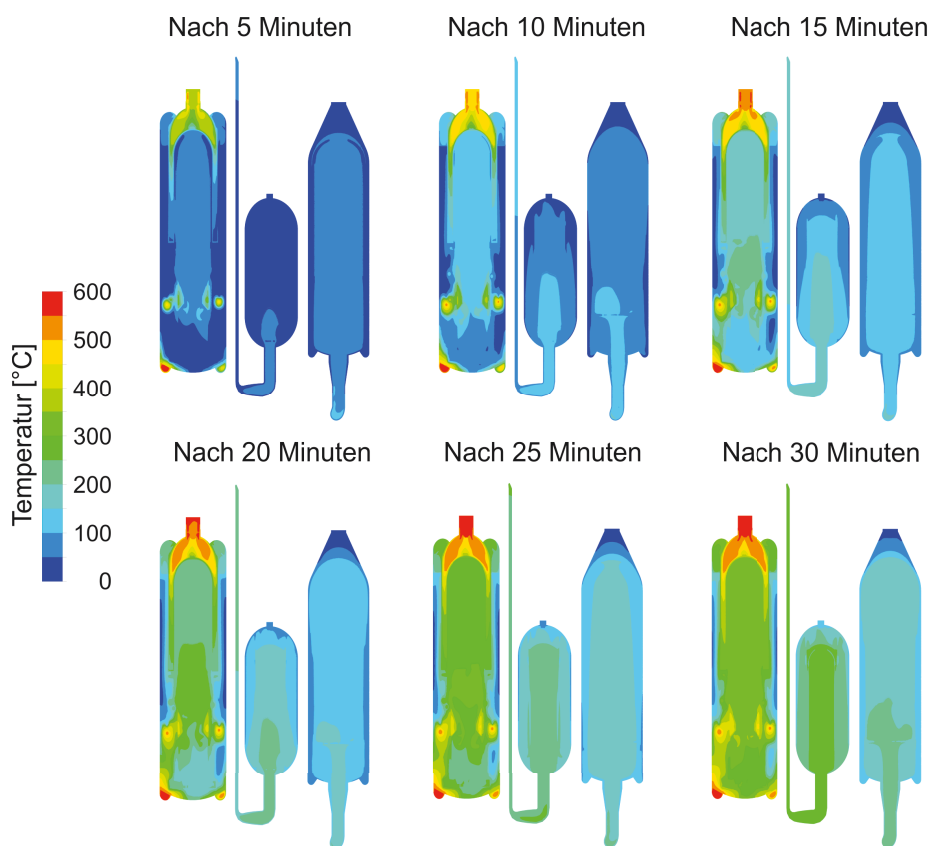


Abb. 8.4: Temperaturprofil während des Aufheizvorgangs in den Brenngaserzeugungskomponenten von Package 6

Durch die Berücksichtigung des Startvorgangs, der sich aus der Berechnung des dreidimensionalen Packages in diesem Kapitel ergibt, sinkt der Wirkungsgrad des Hybridsystems für den Fall einer vorgeheizten Brennstoffzelle auf 24,8 % ab. Dies zeigt deutlich, dass die Anzahl und die Länge der Verbindungsrohre, die bei der zweidimensionalen Simulation vernachlässigt wurden, stark reduziert werden müssen.

## 8.2 Wichtigste Erkenntnisse dieser Arbeit

Die wichtigsten mit der entwickelten Gesamtmethodik erreichten Erkenntnisse sind im Folgenden aufgelistet:

1. Entwicklung von zwei Konzepten für den Start des Brennstoffzellensystems
  - Thermischer Startvorgang: Das System wird indirekt durch einen Startbrenner aufgeheizt.
  - Elektrischer Startvorgang: Das System wird durch elektrisch erhitze Luft aufgeheizt und der benötigte Wasserdampf wird im Reformer produziert.
2. Optimierung des Startvorgangs des Brenngaserzeugungssystems
  - Der Katalytbrenner sollte beim Start zusätzlich elektrisch beheizt werden.
  - Eine Aufheizung mit Wasserdampf ist energetisch nicht sinnvoll.
  - Das System sollte parallel durch verschiedene Stränge aufgeheizt werden.
3. Hybridisierung des Brennstoffzellensystems
  - Sowohl die passive, als auch die aktive Hybridverschaltung sind für den Anwendungsfall der Bordstromversorgung geeignet.
  - Die Brennstoffzelle sollte durch eine aktive Hybridverschaltung mit der Batterie gekoppelt werden, um auf verschiedene Leistungsbedarfsprofile reagieren zu können.
  - Der Startvorgang des Systems sollte ausgeführt werden, bevor ein Leistungsbedarf der Anwendung anfällt.
  - Die Brennstoffzelle sollte hinsichtlich ihres Gewichts optimiert und durch die Abwärme der Anwendung aufgeheizt werden.
4. Packaging des Brenngaserzeugungssystems
  - Der Wärmeübertrager für den Startvorgang konnte maßgeschneidert für den Anwendungsfall entwickelt und der Startbrennerbetrieb auf den Wärmeübertrager und die Anforderungen des Systems abgestimmt werden
  - Die Aufheizung und das integrierte Verdampfungskonzept im Reformer konnten erfolgreich überprüft werden.

- Die integrierte Bauweise konnte am Beispiel des Wassergasshiftreaktors demonstriert werden.
5. Die Gesamtmethodik konnte für den Einsatzfall der Bordstromversorgung in einem neuen Packagekonzept angewendet werden.
- Dreidimensionale Simulation der Kernkomponenten von Package 6 während des Startvorgangs wurden durchgeführt.
  - Vereinfachungen der Anschlüsse führen zu deutlichen Abweichungen bei den transienten Berechnungen.
  - Für die Optimierung des Packages müssen dreidimensionale Berechnungen des gesamten Systems durchgeführt werden.

Die entwickelte Methodik bildet die Grundlage für die Entwicklung eines kompakten zylindrischen Packages. Weiterhin wurde eine Methodik für die Dimensionierung und Bewertung von Hybridsystemen entwickelt. Die Integration des Startvorgangs in die Packageentwicklung auf der einen Seite und in die Hybridisierung auf der anderen Seite, ermöglichte eine ganzheitliche Betrachtung der Bausteine Packaging, Startvorgang und Hybridisierung. Die Gesamtmethodik wurde für die Optimierung des aktuellen Brennstoffzellensystems angewendet. Durch die Gesamtmethodik können sowohl bestehende, als auch neue Systeme (weiter-)entwickelt und optimiert werden, wodurch es möglich ist, eine Vielzahl der Anforderungen an ein mobiles System zu erfüllen.

## 9 Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung einer Methodik um ein Brennstoffzellensystem mit Dieselreformierung gesamtsystemisch weiterzuentwickeln. Aus dem Abgleich der Eigenschaften des bestehenden Systems und den Anforderungen der mobilen Anwendung, ergaben sich die drei Bausteine Anfahrvorgang des Brennstoffzellensystems, Hybridisierung des Brennstoffzellensystems und Packaging des Brenngaserzeugungssystems. Diese drei Themengebiete wurden in dieser Arbeit miteinander vernetzt betrachtet und optimiert.

Die Ausgangslage dieser Arbeit war ein Brennstoffzellensystem, bestehend aus einer Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzelle und der Brenngaserzeugung durch Reformierung von Dieselmotorkraftstoffen. Der für die Brennstoffzelle benötigte Wasserstoff wird bei diesem System, erst kurz bevor er in der Brennstoffzelle umgesetzt wird, erzeugt. Das Brenngaserzeugungssystem muss beim Start des Systems aufgeheizt werden, bevor die Reformierungsreaktion starten kann. Beim Betrieb im Teststand wird das System durch extern aufgeheizte Luft aufgewärmt. Um die externen Heizpatronen dieses Systems zu ersetzen, wurde in einer vorangegangenen Arbeit ein Startbrenner ausgewählt, aber nicht in ein Package integriert. Eine Anforderung der mobilen Anwendung ist ein schneller und autarker Startvorgang. Weiterhin muss das System auf Leistungsbedarfsänderungen reagieren und die benötigte Leistung bereitstellen. Das aktuelle System ist nicht in der Lage auf schnelle Leistungsbedarfsänderungen zu reagieren, da zuerst die benötigte Menge an Wasserstoff bereitgestellt werden muss. Die ins System zugegebenen Edukte müssen somit auf den Leistungsbedarf angepasst werden, was eine sofortige Änderung der Leistung verhindert. Um die Leistung trotzdem bedarfsgerecht bereitzustellen und einen autarken Startvorgang durchführen zu können, muss das Brennstoffzellensystem mit einem elektrischen Energiespeicher gekoppelt werden. Der Energiespeicher wird bei dieser Verschaltung für die Leistungsbereitstellung während des Startvorgangs und die Abfederung von Leistungsbedarfsänderungen verwendet. Die Brennstoffzelle kann in dieser Verschaltung mit einer konstanten Leistung betrieben werden. Für die mobile Anwendung ist weiterhin eine hohe Energie- und Leistungsdichte entscheidend. In den bisherigen Brenngaserzeugungspackages wurden die Brenngaserzeugungskomponenten platzsparend nebeneinander angeordnet. Um eine weitere Erhöhung der Energie- und Leistungsdichte zu erreichen, müssen die einzelnen Komponenten kompakt ineinander integriert werden.

Als methodischer Ansatz wurden in dieser Arbeit Berechnungsmethoden, mit unterschiedlichem Detaillierungsgrad, mit experimentellen Untersuchungen verknüpft. Thermodynamische Berechnungen wurden im Rahmen dieser Methodik zur ersten Überprüfung neuer Konzepte durchgeführt. Ausgehend von den so überprüften Konzepten wurden dynamische Systemsimulationen und strömungsdynamische Simulationen (CFD) durchgeführt. Für die dynamischen Systemsimulationen wurde ein dynamisches Modell des Brenngaserzeugungssystems erstellt. Dieses Modell basiert auf der Verschaltung von idealen Rührkesselreaktoren, die das Ver-

halten der Brenngaserzeugungskomponenten wiedergeben. Weiterhin wurden Modelle für die Startkomponenten und die Steuerung des Brenngaserzeugungssystems in das Gesamtmodell integriert. Das modular aufgebaute Modell wurde in einem zweiten Schritt um Modelle für die elektrischen Komponenten und die Steuerung im Hybridsystem erweitert. Dieses System ermöglichte eine gekoppelte Betrachtung der Themen Startvorgang und Hybridisierung. Die strömungsdynamischen Simulationen geben einen orts aufgelösten Einblick in die Reaktoren und bilden die Geometrie und das Verhalten der Reaktoren detaillierter und genauer ab, als die dynamischen Systemsimulationen. Um den Startvorgang durch die strömungsdynamischen Simulationen optimieren zu können, wurden verschiedene Modelle für poröse Körper in transienten Simulationen untersucht. Das Zweizonenmodell konnte experimentell validiert werden, wohingegen die Verwendung des Einzonenmodells zu großen Abweichungen führte. Um das gesamte Package zweidimensional zu simulieren, wurde eine benutzerdefinierte Funktion zur Kopplung der Reaktoren entwickelt. Durch das Zweizonenmodell und die benutzerdefinierte Funktion konnte somit der Aufheizvorgang des Systems simuliert und optimiert werden. Für die Entwicklung des Packages wurden verschiedene Möglichkeiten für eine dreidimensionale Rechengittererzeugung betrachtet. Durch den gezielten Einsatz der Vernetzung mit nicht konformen Grenzflächen (Interface-Vernetzung) konnte die Rechenzeit dramatisch reduziert werden. Diese Vernetzungsmethodik ermöglichte die dreidimensionale Simulation einzelner Packagekomponenten und eines Gesamtpackages in einer geringen Rechenzeit. Durch die Verwendung des Zweizonenmodells können diese Simulationen ebenfalls transient durchgeführt werden. Unterstützend zu diesen Simulationen wurden Experimente zur Validierung der Berechnungen und zur Bestimmung der Randbedingungen durchgeführt. Mit der entwickelten Methodik ist eine gesamtsystemische Optimierung der drei Bereiche Startvorgang, Hybridisierung und Packaging möglich geworden.

Zusammenfassend wurde in dieser Arbeit das übergeordnete Ziel der Entwicklung einer Methodik zur gesamtsystemischen Optimierung erreicht. Die entwickelte Methodik wurde zur Weiterentwicklung des bestehenden Brennstoffzellensystems mit Dieselreformierung angewandt. Durch diese Vorgehensweise wurden, neben der Entwicklung der Methodik, drei weitere wesentliche Ergebnisse erzielt:

1. Der Startvorgang des Brenngaserzeugungssystems wurde erstmals durch die strömungsdynamischen Simulationen berechnet und optimiert. Der integrierte Wärmeübertrager des ATR 12, der im stationären Zustand den Wasserdampf überhitzt, wirkt sich bei der externen Aufheizung mit Luft negativ auf das Aufheizverhalten des Reformers aus. Weiterhin führt die Verwendung von Wasserdampf zur Aufheizung des Systems zu einer Verzögerung der Aufheizung. Um einen elektrischen Startvorgang durchzuführen, wurde ein Konzept für die integrierte Wasserverdampfung im Reformer während des Startvorgangs entwickelt. Die interne Aufheizung im Reformer beschleunigte den Aufheizvorgang von 22 Minuten auf 16 Minuten. Die parallele Aufheizung durch den Dampf- und den Luftweg des Reformers und die zusätzliche Beheizung des Katalytbrenners verkürzte die Aufheizzeit von 22 Minuten auf 9,5 Minuten. Durch die Berücksichtigung der Verrohrung in Package 6 stieg die Aufheizzeit in der dreidimensionalen Simulation für diesen

---

Fall jedoch auf 30 Minuten an. Dies zeigt, dass die Systeme dreidimensional optimiert werden müssen.

2. Durch den Einsatz des Gesamtsystemmodells konnte eine Hybridverschaltung für die Anwendung der Bordstromversorgung ausgewählt werden. Es wurde die aktive Hybridverschaltung gewählt, um die Leistung der Brennstoffzelle anpassen und auf wechselnde Leistungsbedarfsprofile reagieren zu können. Für die betrachtete Anwendung der Bordstromversorgung beträgt der Wirkungsgrad, für einen Betrieb der Brennstoffzelle bei einer konstanten Leistung, 29,3 %. Durch einen dynamischen Betrieb des Brennstoffzellensystems sinkt dieser für das betrachtete Leistungsbedarfsprofil auf bis zu 26,1 % ab. Für diesen dynamischen Betrieb wird die benötigte Batteriegröße gleichzeitig jedoch um bis zu 87 % reduziert. Die Berücksichtigung des Startvorgangs führt zu einem Absinken des Wirkungsgrades auf 25,3 %, wobei die Batterie um den Faktor 2,6 größer dimensioniert werden muss, als es ohne Startvorgang notwendig wäre. Die Batteriegröße wird hauptsächlich durch die Leistung, die während des Startvorgangs von der Anwendung abgefragt wird, bestimmt. Der Systemwirkungsgrad steigt für einen thermischen Startvorgang, der durchgeführt wird, bevor von der Anwendung eine Leistung benötigt wird, auf 26,2 % an. Wenn die Brennstoffzelle durch Abwärme der Anwendung aufgeheizt werden kann, steigt der Wirkungsgrad des Systems für das verwendete Leistungsbedarfsprofil sogar auf 28,1 %.
3. Durch die optimierte Vernetzungsmethodik und die dreidimensionalen Simulationen wurden Komponenten für Brenngaserzeugungspackages entwickelt. So wurde ein Wärmeübertrager entwickelt, der einen Betrieb des Systems mit dem ausgewählten Startbrenner ermöglicht. Das auf dem thermischen Startvorgang basierende Brenngaserzeugungspackage kommt mit den Startkomponenten und der Isolierung auf ein Volumen von 77,9 l und somit auf eine Leistungsdichte von 128 W/l. Für den elektrischen Startvorgang wurde die Integration eines elektrischen Heizelements in den Reformier erfolgreich demonstriert. Dieser Aufbau ermöglicht die Aufheizung des Reformers und die Verdampfung von Wasser im Reformier, sodass auf externe Heizelemente verzichtet werden kann. In Experimenten konnten der Aufheizvorgang des Reformers und die Bereitstellung von Wasserdampf für die Zündung, alleine mit dem integrierten Heizelement, innerhalb von 30 Minuten abgeschlossen werden. Weiterhin wurde die integrierte Bauweise am Beispiel des zweistufigen Wassergasshiftreaktors gezeigt. Der Wärmeübertrager im Reformier wirkt sich bei der internen Aufheizung positiv auf das Aufheizverhalten des Systems aus.

Die in dieser Arbeit entwickelte Methodik wurde somit erfolgreich zur Weiterentwicklung des bestehenden Brennstoffzellensystems eingesetzt. Durch die Anwendung der Methodik auf das bestehende System konnten die Kernpunkte der Methodik bereits überprüft und validiert werden.

Durch die Verwendung aller in dieser Arbeit entwickelten Werkzeuge kann eine Optimierung hin zu einem kompakten und effizienten System durchgeführt werden. Die im Rahmen dieser



Arbeit entwickelten Packages 5 und 6 dienen für eine weitere Optimierung als Ausgangspunkt. Die in der Methodik verwendeten Modelle sind allgemein gültig und es existieren keine Einschränkungen auf das bestehende System. Somit kann die Methodik ebenso auf andere Systeme angewendet werden.





# A Ergänzende Informationen zu Kapitel 5

## A.1 Dynamische Systemsimulation

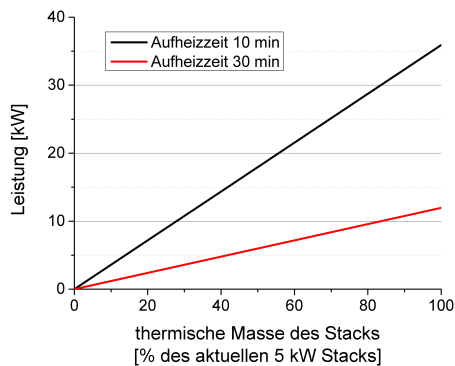


Abb. A.1: Aufheizung des Jülich IV Stacks

Die Verdichterkennlinie für den Luftverdichter wurde [101] entnommen. Für die Luftzufuhr zum Reformer wurde von einem konstanten Gegendruck von 0,5 bar und für die Brennstoffzelle und den Katalytbrenner von 1,1 bar ausgegangen.

Komponente	Material	Anzahl	Gewicht pro Modul [kg]	Wärmekapazität [J/kgK]
Angaben für 1 Modul mit 12 Zellen und 3 Kühlzellen				
Endplatte Anode	Aluminium	1	7,48	910
Endplatte Kathode	Aluminium	1	7,48	910
Kühlzelle Anode	Edelstahl	1	4,627	500
Kühlzelle Kathode	Edelstahl	2	9,255	500
Stromabnehmer	Edelstahl	2	1,970	500
Bipolarplatte (FF beidseitig)	Graphite Composite	8	2,30	950
Bipolarplatte (FF einseitig)	Graphite Composite	8	2,566	950
Zuganker	Edelstahl	18	1,126	500
Zusätzliche Komponenten bei einem Stack				
Gasversorgung Anode	Edelstahl	1	9,451	500
Gasversorgung Kathode	Edelstahl	1	9,451	500
Verbindung Stromabnehmer	Kupfer	2	0,445	385

Tabelle A.1: Komponenten des Jülich IV HT-PEFC-Stacks

Komponente	
Reaktion	Annahme
Reformer ATR	
POX:	Vollständiger Umsatz des Sauerstoffs
SR:	Vollständiger Umsatz des Kraftstoffs
WGS:	56 % des CO werden umgesetzt
Meth:	Methanisierung setzt 2,2 % $H_2$ um
Wassergasshiftreaktor WGS	
WGS:	Kennfeld für den Umsatz des CO in Abhängigkeit der Temperatur und der eingedüsten Wassermenge
Katalytbrenner KB	
TOX:	Vollständiger Umsatz aller brennbaren Komponenten

Tabelle A.2: Annahmen für die im Brenngaserzeugungssystem ablaufenden Reaktionen

Bauteil	Volumen [l]	thermische Masse [J/K]		Wärmestrom [W/K]	
		Wand	Zwischenwand	Wand	Zwischenwand
ATR					
Mischkammer	1	451	/	14	/
Monolith	0,68	1842	/	0,18	/
WÜ Reformatseite	1,27	1574	652	23,3	21,32
WÜ Dampfseite	0,27	/		/	6,56
WGS					
HTS	0,5	1164	/	0,126	/
NTS	1,8	2534	/	0,324	/
RLWÜ					
Reformatseite	1	/	1590	/	39,85
Luftseite	1	/		/	31,88
KB					
Monolith	1,29	1453	/	0,1	/
WÜ Abgasseite	0,874	/	540	/	15
WÜ Wasserseite	0,46	677		23,33	12
Startkomponenten					
Startbrenner	1	Temperaturprofil wird dem Experiment entsprechend vorgegeben			
Wärmeübertrager Abgasseite	1 / 1	/	1000 / 1000	/	40 / 40
Wärmeübertrager Luftseite	1 / 1	/	/	/	20 / 20
elektrisches Heizelement	1	Annahme: Vernachlässigbare Masse der elektrischen Heizung			

Tabelle A.3: Parameter des Brenngas erzeugungssystems in der 10 kW<sub>e</sub>-Leistungsklasse [91]

## A.2 Zusätzliche Ergebnisse der strömungsdynamischen Simulationen

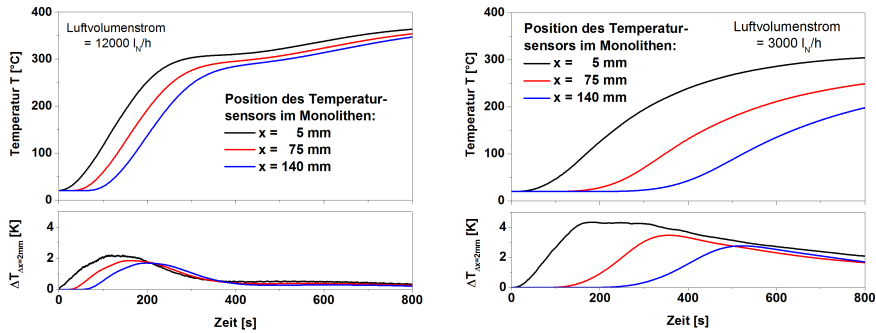


Abb. A.2: Aufheizung des Reformers: Fehlerabschätzung bei der Position des Thermoelements

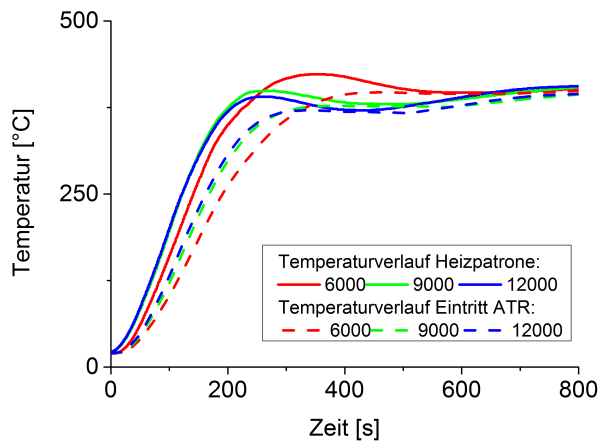


Abb. A.3: Aufheizung des Reformers: Temperaturverlauf der Heizpatrone und simulierter Temperaturverlauf am Eintritt des Reformers

## A.3 Benutzerdefinierte Funktion für die Kopplung des Druckes

```

DEFINE_PROFILE(pressure_profile_gap, t, i)
{
    ... /* Deklaration der Hilfsvariablen*/

    int zone_ID = 112; /* Festlegung des Eintritts in den zweiten Reaktor, Wert muss aus Fluent ausgelesen werden */

    Thread *tsum;
    face_t fsum;
    face_t f;
    FILE *fp;
    domain = Get_Domain(1); /* Festlegung der Domain, auf der der Thread ausgelesen werden soll */
    tsum = Lookup_Thread(domain, zone_ID); /* Bestimmung des Threads zur Auslesung der Werte */

    /* Bestimmung des über die Fläche gemittelten Druckes */
    begin_f_loop(fsum, tsum)
    {
        real NV_VEC(farea);
        F_AREA(farea, fsum, tsum);
        area = NV_MAG(farea); /*Bestimmung der Fläche*/

        sum_pressure += F_P(fsum, tsum)*area; /* Aufsummierung des Produktes aus Fläche und Druck*/
        sum_area += area; /* Aufsummierung der Fläche */
    }
    end_f_loop(fsum, tsum)

    pressurevalue = sum_pressure/sum_area; /* Berechnung des über die Fläche gemittelten Druckes */

    /* Überprüfung, ob der ausgelesene Wert eine Zahl ist */
    if (pressurevalue == pressurevalue) /* Überprüfung, ob der ausgelesene Wert eine Zahl ist */
    {
        p_ausgelesen1 = pressurevalue; /* Wenn ja, Übergabe der Zahl*/
    }
    else
    {
        pressurevalue = 0; /* Wenn nein, setzen des Druckes zu 0 */
    }

    /* Übergabe der ausgelesenen Werte an alle Prozessoren und */
    pressurevalue = PRF_GRSUM1(pressurevalue); /* Globale Summierung der Zählvariable */
    if (pressurevalue == 0) /* Wenn kein Wert bestimmt werden konnte wird der vorher bestimmte Wert verwendet */
    {
        pressurevalue = p_ausgelesen1;
    }

    /* Berechnung des neuen Druckwertes */
    pressurechange = (pressurevalue - p_nminuseins1)*URF; /* Berechnung der Änderung des Druckes*/
    p_nminuseins1 += pressurechange; /* Berechnung des neuen Druckes */
    pressurevalue = p_nminuseins1;

    /* Übergabe des Berechneten Werten an Fluent */
    begin_f_loop(f, t) /* Schleife über alle Flächen */
    {
        F_PROFILE(f, t, i) = pressurevalue; /* Übergabe des berechneten Wertes an den Strömungslöser */
    }
    end_f_loop(f, t)
}

```

Abb. A.4: Erstellte benutzerdefinierte Funktion (UDF) für die Kopplung des Druckes zwischen zwei 2D-Modellen





## B Ergänzende Informationen zu Kapitel 6

Im Rahmen der Zusammenarbeit mit dem Institut für Kraftfahrzeuge der RWTH Aachen und dem IEK-3 im Projekt "Elektrochemische Speicher im System - Sicherheit und Integration" wurde vom Institut für Kraftfahrzeuge die Batterie SAFT VL7P hinsichtlich ihrer offenen Zellspannung und des Innenwiderstandes charakterisiert. Die ermittelten Werte sind in Abbildung B.1 in Abhängigkeit vom Ladezustand dargestellt.

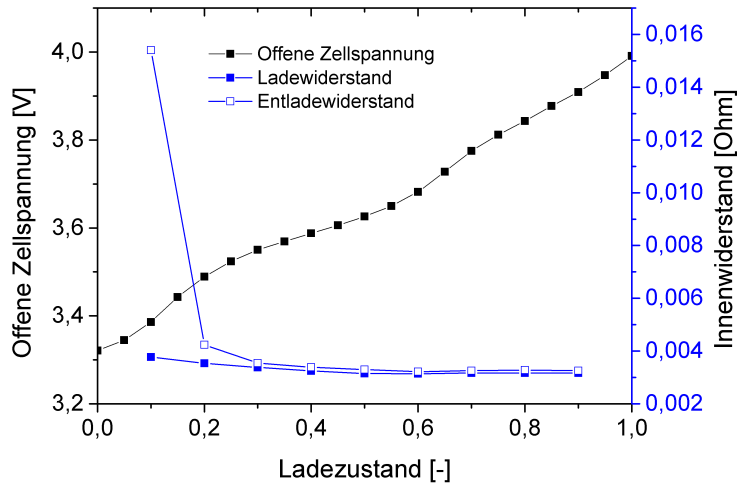


Abb. B.1: Offene Zellspannung und Innenwiderstand der SAFT VL7P Batterie

Mit den gemessenen Kennwerten und dem Batteriemodell wurde der leistungsbezogene Wirkungsgrad der Batterie in Abhängigkeit von der C-Rate simuliert. Die Batterie wurde zuerst um 10 % ihrer Kapazität entladen und anschließend wieder auf den ursprünglichen Ladezustand von 60 % geladen. Die Ergebnisse sind in Abbildung B.2 dargestellt.

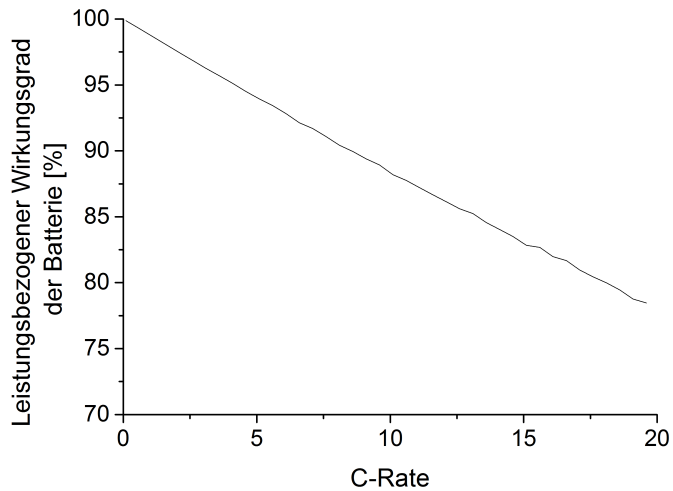


Abb. B.2: Wirkungsgrad der SAFT VL7P Batterie bei einem anfänglichen Ladezustand von 60 % und einer Entladetiefe von 10 %

## C Ergänzende Informationen zu Kapitel 7

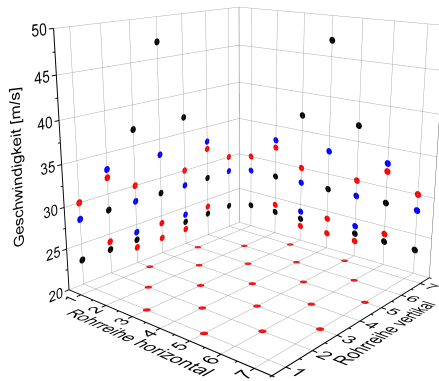


Abb. C.1: Geschwindigkeitsverteilung im Rohrbündelwärmeübertrager; Vergleich zwischen dem Fall ohne Verteilblech (schwarz) und dem Einbau verschiedener Bleche (rot, blau)

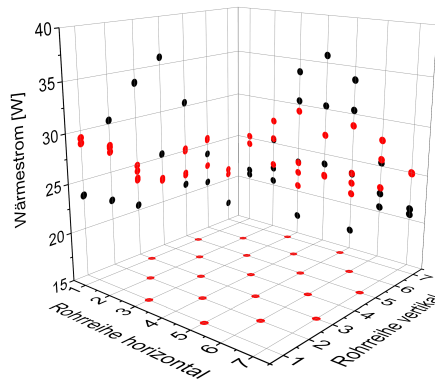


Abb. C.2: Wärmestrom in den Rohren des Rohrbündelwärmeübertragers; Vergleich zwischen dem Fall ohne Verteilblech (schwarz) und dem Einbau eines Bleches (rot)

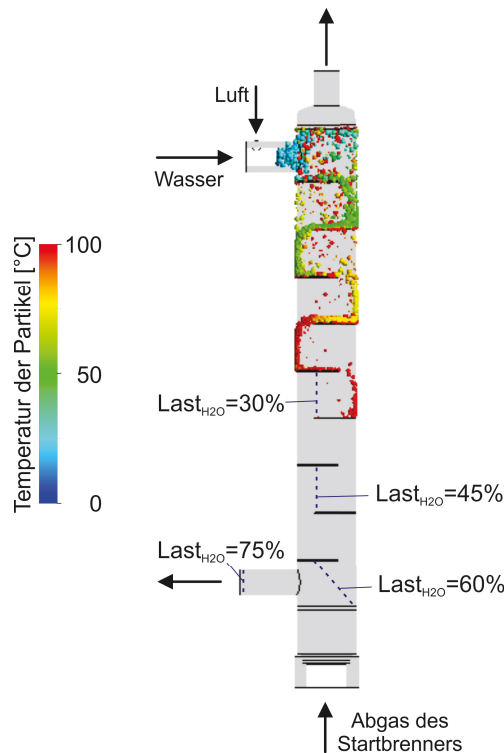


Abb. C.3: Tropfenverteilung im Wärmeübertrager für einen Luftmassenstrom von 14 kg/h und eine Wassermenge von 30 % der maximalen Wassermenge und Wassertropfengrenzen bei einer Leistung von 6,7 kW des Startbrenners. [100]

## C.1 Wärmeübertrager für den Startvorgang

Die Eindüsung des Wassers in einen Luftmassenstrom von 14 kg/h ist in Abbildung C.3 für 30 % der maximalen Wassermenge von 6,7 kg/h dargestellt. Die zugegebene Wassermenge bezogen auf die maximale Wassermenge im Betrieb wird im Folgenden als Wasserlast bezeichnet. Zusätzlich sind die Tropfengrenzen für 45 %, 60 % und 75 % der Wasserlast dargestellt. Dies entspricht Massenströmen von 3, 4 bzw. 5 kg/h Wasser.

Die Wassertropfen werden in dieser Darstellung oben links eingedüst. An dieser Stelle befindet sich auch der Lufteinlass des Wärmeübertragers. Die Wasserpartikel sind mit ihrer Temperatur farblich gekennzeichnet. Sie werden mit 20 °C eingedüst und verdampfen im Wärmeübertrager. Bei einer Wassermenge von 30 % der maximalen Wassermenge im Reformier werden sie nach dem fünften Umlenkblech im Wärmeübertrager vollständig verdampft. Eine erhöhte Wassermenge entsprechend einer Last von 60 % kann noch vollständig verdampft werden. Bei einer

Wasserlast von 75 % kommen die ersten Tropfen jedoch bis zum Austritt des Wärmeübertragers. Die Aufheizung des Systems mit zusätzlichem Wasserdampf beschleunigt nach den dynamischen Systemsimulationen aus Kapitel 5.2.2 die Aufheizzeit geringfügig. Energetisch ist die Verwendung dieser Phase bei dem aktuellen System nicht sinnvoll.

Die entsprechenden Eintritts- und Austrittstemperaturen des Wärmeübertragers sind für eine Variation der Wassermenge in Abbildung C.4 gezeigt. Beide Austrittstemperaturen sinken mit zunehmender Wassermenge deutlich ab. Das Startbrennerabgas wird in diesem Diagramm als Medium 1 und das Luft-/Wasserdampfgemisch als Medium 2 bezeichnet. Beide Austrittstemperaturen sinken mit steigender Wasserzufuhr. Eine Erhöhung der Wasserzufuhr von 30 % auf einen höheren Wert hat kaum Einfluss auf die Temperatur des Abgases. Die übertragene Wärmemenge steigt mit steigender Wasserzugabe kaum an. Zwischen dem Fall mit 30 % der Wassermenge und dem Fall ohne Wasser ist jedoch ein deutlicher Unterschied zu erkennen. Der Fall mit 15 % der Wassermenge wurde nicht berechnet, da die Temperatur bei 30 % der Wassermenge schon oberhalb der Temperaturgrenze von 600 °C lag.

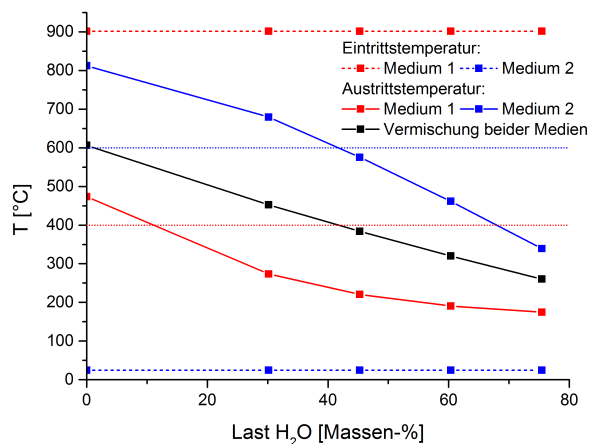


Abb. C.4: Ein- und Austrittstemperaturen im Startbrenner-Wärmeübertrager bei einer Startbrennerleistung von 6,7 kW und einem Luftmassenstrom von 14 kg/h [100]

Aus Abbildung C.4 ist ersichtlich, dass der Wärmeübertrager im Gegenstrom betrieben werden muss. Für die berechnete Leistung von 6,7 kW würde die geforderte Eintrittstemperatur der Luft von 600 °C nur für eine Vermischung der Gase oder einem sehr großen Gleichstromwärmeübertrager erreicht. Die Luft erreicht für den Gegenstromwärmeübertrager eine Temperatur von 812 °C. Diese Temperatur überschreitet die für den Reformer zulässige Temperaturgrenze von 600 °C deutlich. Durch die Zugabe von Wasser wird die Temperatur gesenkt, sodass bei einer Wassermenge von 42 % der maximalen Wassermenge die Temperaturgrenze von

600 °C erreicht wird. Für diesen adiabaten Fall wäre eine Wasserzugabe von 42 % sinnvoll, um die Aufheizzeit zu beschleunigen. Der Druckverlust beträgt in dieser Phase maximal 20 mbar auf der Abgasseite und 34 mbar auf der Luftseite. Mit zunehmender Wassereindüsung sinkt der Druckverlust durch die sinkende Temperatur und den dadurch sinkenden Volumenstrom ab.

## C.2 Mikrostrukturwärmeübertrager

Neben dem für den Startvorgang benötigten Wärmeübertrager werden weitere Wärmeübertrager im System benötigt. Einer dieser Wärmeübertrager ist der Reformat-Luft Wärmeübertrager. In diesem wird das aus dem Wassergasshiftreaktor austretende Reformat auf eine Temperatur von 160 °C runtergekühlt und die Luft auf diese Temperatur aufgeheizt. Im Package 5 soll für diesen Zweck ein Mikrostrukturwärmeübertrager eingesetzt werden, der in einer Kooperation mit dem Institut für Mikrostrukturverfahrenstechnik des Karlsruher Instituts für Technologie entwickelt wurde. Dieser wurde vor dem Einsatz im System hinsichtlich seiner übertragenen Wärmeleistung und des zu erwarteten Druckverlusts untersucht.

Die Ergebnisse dieser Untersuchung sind in den Abbildungen C.5 und C.6 dargestellt. Der Wärmeübertrager wird im System im Gleichstrom durchströmt und ist aus einer Vielzahl von Folien aufgebaut. Auf der Folienebene werden die Kanäle im Kreuzstrom durchströmt. Die beiden Passagen des Wärmeübertragers unterscheiden sich hinsichtlich der Anzahl und Länge der Kanäle. Die für das Reformat gedachte Passage 1 besitzt 8 Kanäle pro Folie mit einer Länge von 39 mm. Die von Luft durchströmte Passage 2 enthält 26 Kanäle pro Folie mit einer Länge von 14 mm. Die Breite und Tiefe der Kanäle unterscheiden sich laut Datenblatt nicht.

In Abbildung C.5 sind die Temperaturen und Druckverluste für den Fall, dass das Reformat durch Passage 1 strömt, dargestellt. Die Eintrittstemperatur des Reformats wurde auf 320 °C eingestellt. Der Reformatstrom bei Volllast wurde durch einen Luftvolumenstrom von 556 NI/min ersetzt. Es wurde darauf geachtet, dass die Wärmekapazität des Gemischs während des Betriebs im Teststand im Vergleich zum Betrieb im System gleich bleibt. Auf der Luftseite wird der Wärmeübertrager von 671 NI/min Luft durchströmt. Die Temperatur des Ofens wurde jeweils so angepasst, dass die Temperatur von 320 °C am Eintritt in den Wärmeübertrager erreicht wird. Die Austrittstemperaturen liegen für diesen Fall für die Reformatseite zwischen 161 °C und 154 °C und für die Luftseite zwischen 149 °C und 155 °C. Die gewünschten Austrittstemperaturen des Wärmeübertragers werden über den gesamten Leistungsbereich erreicht. Der Druckverlust auf der Luftseite beträgt für diesen Fall 35 mbar bei Volllast und 7 mbar bei 20 % Teillast. Bei diesem Betriebsfall ist jedoch der Druckverlust auf der Reformatseite relativ hoch. Dieser beträgt 200 mbar bei Volllast und 27 mbar bei 20 % Teillast.

Die Temperaturen und Druckverluste für den Fall, dass Passage 2 als Reformatseite benutzt wird, sind in Abbildung C.6 aufgetragen. In diesem Fall wird der zweite Ofen des Teststandes so aufgeheizt, dass die Eintrittstemperatur der Passage 2 320 °C beträgt. Bei dem niedrigsten Leistungspunkt von 20 % wirken sich die Wärmeverluste in den Rohrleitungen des Teststands

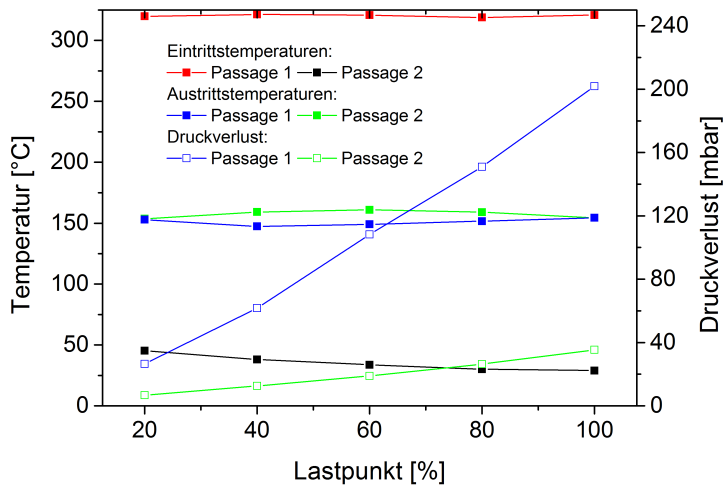


Abb. C.5: Temperaturen und Druckverluste des Mikrostruktur-Wärmeübertragers bei der Durchströmung von Passage 1 mit Reformat

so stark aus, dass die Temperatur durch die Wärmeverlust auf 305 °C absinkt. Die Austrittstemperaturen des Reformats und der Luft sollten bei diesem Wärmeübertrager etwa 160 °C betragen. Die Reformataustrittstemperatur sinkt ausgehend vom Betrieb mit 100 % der Stoffströme bis zu 20 % der Stoffströme von 146 °C auf 136 °C ab. Die Luftaustrittstemperatur steigt bei einer Reduzierung der Stoffströme von 173 °C bei 100 % auf 184 °C bei 20 % an. Der Druckverlust auf der Reformatseite beträgt für diese Fälle 27 mbar bei Volllast und 5 mbar bei 20 % der Stoffströme. Der Druckverlust auf der Luftseite beträgt 230 mbar bei Volllast und sinkt bis auf 30 mbar bei 20 % Teillast ab.

Der Aufheizvorgang des Wärmeübertragers ist in Abbildung C.7 dargestellt. Das Reformat strömt in diesem Fall durch die erste Passage. Es wurden zwei unterschiedliche Versuche durchgeführt. Die Passage 2 wurde in einem ersten Versuch von der normalen Luftmenge von 671 NI/min und in einem zweiten Versuch nicht durchströmt. Bei einer Durchströmung beider Passagen ist die Reformataustrittstemperatur nach etwa 20 Minuten nahezu konstant. Dies dauert bei einer ausschließlichen Durchströmung von Passage 1 30 Minuten. Für diesen Fall wird mit 360 °C im Vergleich zu 170 °C jedoch auch eine deutlich höhere Temperatur erreicht. Die Lufttemperatur benötigt sehr lange, bis sich eine stationäre Endtemperatur einstellt.

Der Mikrostruktur-Wärmeübertrager erreicht für den Auslegungsfall mit Reformat in Passage 1 die gewünschten Temperaturen im stationären Zustand. Der Druckverlust auf der Luftseite ist sehr niedrig, was zu einem guten Wirkungsgrad des Systems führt. Der Druckverlust auf der Re-



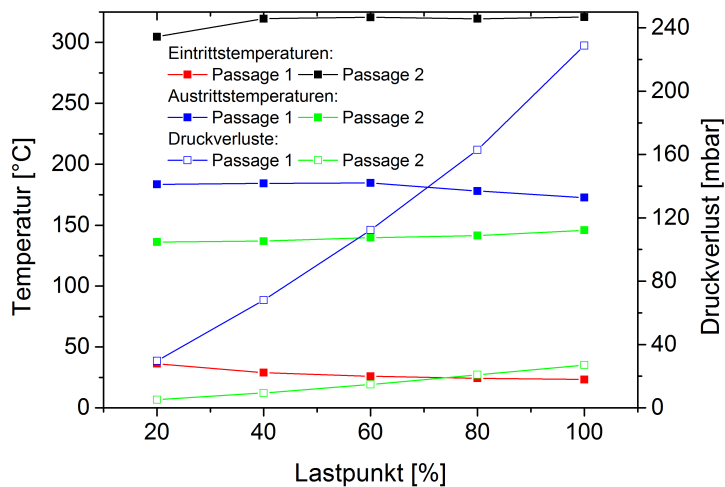


Abb. C.6: Temperaturen und Druckverluste des Mikrostruktur-Wärmeübertragers bei der Durchströmung von Passage 2 mit Reformat

formatseite ist jedoch mit bis zu 230 mbar sehr hoch. Weiterhin hat der Wärmeübertrager eine hohe thermische Masse, sodass der Aufheizvorgang sehr lange dauert. Dieser Wärmeübertrager wird in Package 5 integriert. An dieser Stelle besteht jedoch noch ein Verbesserungspotential hinsichtlich des Druckverlustes und des Aufheizverhaltens.

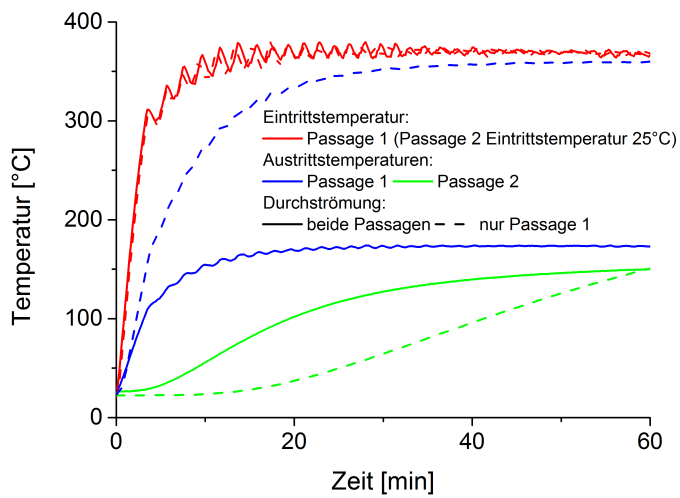


Abb. C.7: Validierung der simulierten Temperaturen für verschiedene Betriebszustände

## C.3 Komponenten Package 6

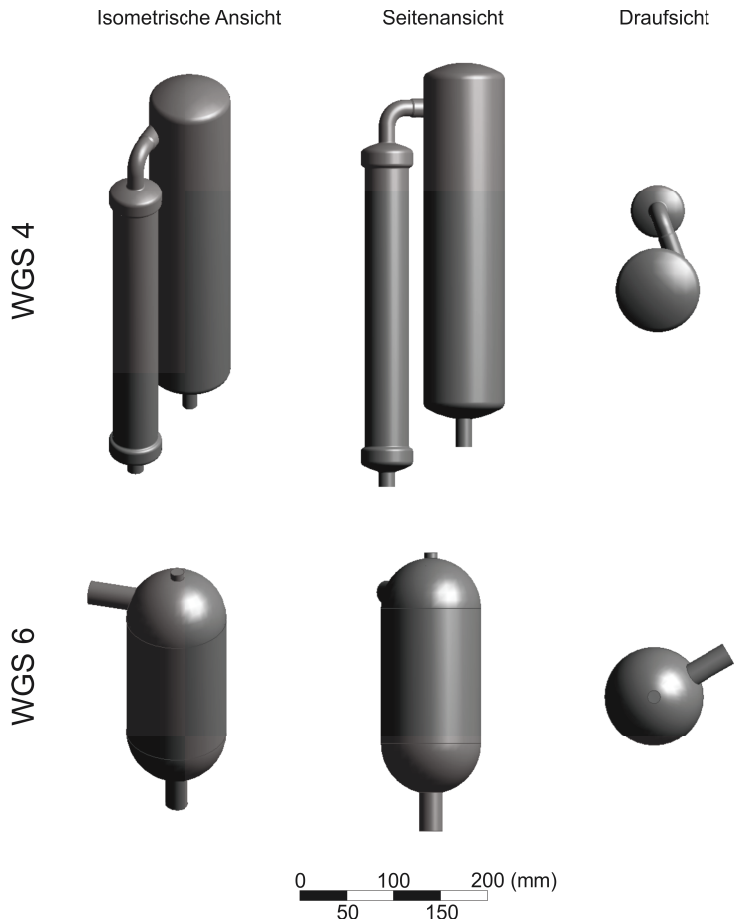


Abb. C.8: Vergleich der Größe von WGS 4 und WGS 6

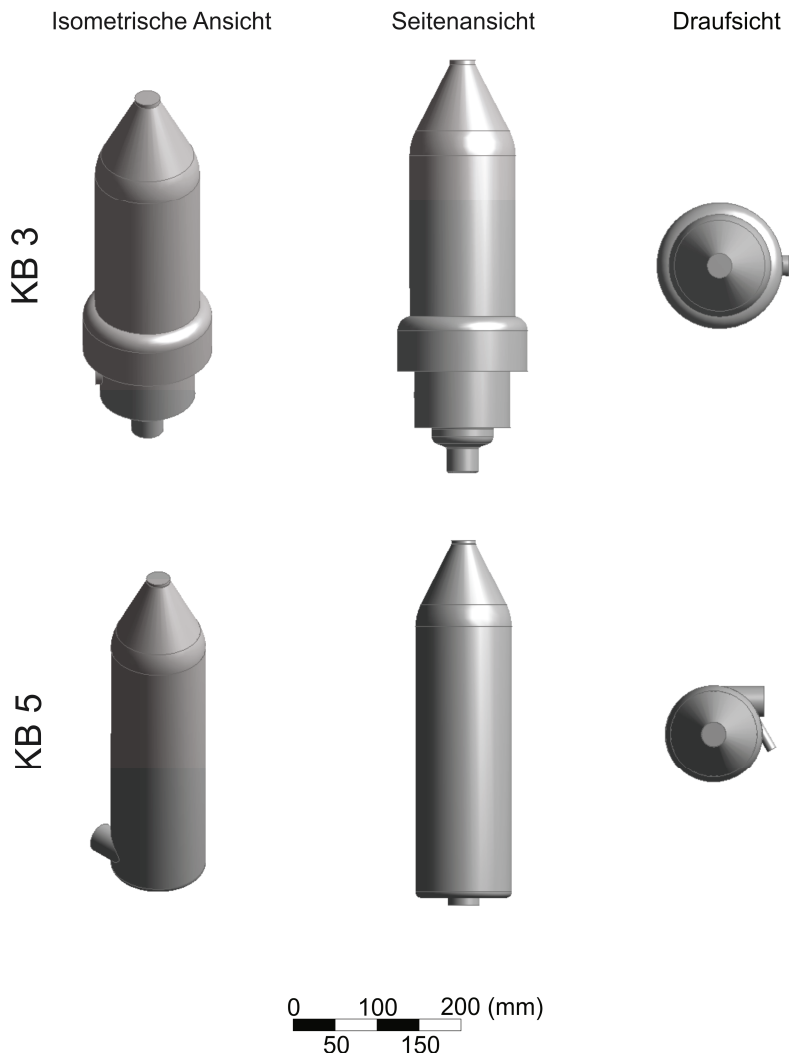


Abb. C.9: Vergleich der Größe von KB 3 und KB 5



# Nomenklatur

## Abkürzungen

$Last_{H_2O}$ .....	Wasserlast, Wassermassenstrom bezogen auf den Wassermassenstrom bei Volllast des Reformers
2D .....	zweidimensional
3D .....	dreidimensional
ANB-Modul .....	Abgasnachbehandlungsmodul
APU .....	auxiliary power unit, Hilfsaggregat
ATR .....	Autothermer Reformer
BS .....	Betriebsstrategie
BtL .....	biomass to liquid, aus Biomasse hergestellter Kraftstoff
C-Rate .....	auf die Kapazität bezogene Stromstärke
CAD .....	computer aided design - Rechnergestütztes Konstruieren
CFD .....	computational fluid dynamics, Strömungsdynamische Simulation
DC .....	Gleichstrom
DCDC-Wandler .....	Gleichstromgleichstrom-Spannungswandler
DOD .....	depth of discharge, Entladetiefe
DOH .....	degree of hybridization, Hybridisierungsgrad
FZ Jülich .....	Forschungszentrum Jülich
GtL .....	gas to liquid, aus Erdgas hergestellter Kraftstoff
HP .....	Heizpatrone
HT .....	Hochtemperatur
HT-PEFC .....	high temperature polymer electrolyte fuel cell, Hochtemperatur-Polymerelektrolytbrennstoffzelle
HTS .....	Hochtemperaturshiftstufe
ICEM-CFD .....	Vernetzungsprogramm von Ansys
IEK-3 .....	Institut für Energie- und Klimaforschung: Elektrochemische Verfahrenstechnik
KB .....	Katalytischer Brenner
KIT .....	Karlsruher Institut für Technologie
LKW .....	Lastkraftwagen
MCFC .....	molten carbonate fuel cell, Schmelzkarbonatbrennstoffzelle
MEA .....	membran electrode assembly, Membranelektrodeneinheit
MPI .....	message passing interface
NiMH .....	Nickelmetallhydrid
NT .....	Niedertemperatur
NTS .....	Niedertemperaturshiftstufe

OCV .....	offene Zellspannung
PEFC .....	polymer electrolyte fuel cell, Polymerelektrolytbrennstoffzelle
PROX .....	Präferentielle Oxidationsreaktion
S-Funktion .....	Eingebetteter Quellcode innerhalb eines Simulink-Blockes
SOC .....	state of charge, Ladezustand
SOFC .....	solid oxide fuel cell, Festoxidbrennstoffzelle
Stack .....	Stapel aus mehreren Zellen
UDF .....	user defined function, benutzerdefinierte Funktion
URF .....	Unterrelaxationsfaktor
USA .....	Vereinte Staaten von Amerika
WGS .....	Wassergasshiftreaktor
ZnO .....	Zinkoxid

### Dimensionslose Kennzahlen

Nu .....	Nusselt-Zahl
Pr .....	Prandtlzahl
Re .....	Reynoldszahl

### Griechische Formelzeichen

$\alpha$ .....	Wärmeübergangskoeffizient
$\bar{\phi}$ .....	gemittelte skalare Größe
$\Delta H_r$ .....	Reaktionsenthalpie
$\Delta H^0_{298K}$ .....	Standardbildungsenthalpie
$\epsilon$ .....	Dissipationsrate
$\epsilon$ .....	Emissionskoeffizient
$\Gamma$ .....	allgemeine Leitfähigkeit
$\gamma$ .....	Porosität
$\nabla$ .....	Nabla-Operator
$\nu$ .....	Stöchiometrikoeffizient
$\bar{\tau}$ .....	Spannungstensor
$\phi$ .....	skalare Größe
$\phi'$ .....	fluktuierender Anteil der skalaren Größe
$\rho$ .....	Dichte

### Indizes

' .....	Edukte
" .....	Produkte
atm .....	atmosphärisch
aus .....	austretend
BZ .....	Brennstoffzelle

eff	effektiv
ein	eintretend
el	elektrisch
elek	elektrisch
f	fluid, Gasphase
max	maximal, maximale
min	minimal, minimale
s	solid, Feststoff
VM	Verbrennungsmotor

### Lateinische Formelzeichen

$\dot{m}$	Massenstrom
$\dot{n}$	Stoffmengenstrom
$\vec{F}$	Kraft
$\vec{g}$	Erdbeschleunigung
$\vec{r}$	Abstand
$\vec{v}$	Geschwindigkeit
$F_{ij}$	Einstrahlungsfaktor
$H_u$	unterer Heizwert
$K_N$	Nennkapazität
$K_r$	Gleichgewichtskonstante
$Q_b$	Ladungsbilanz
$R_i$	Reaktionsrate der Komponente i
$x_i$	Stoffmengenanteile
$Y_i$	Massenanteil der Komponente i
A	Fläche
C	Konzentration
e	Energie
F	Leistungsverhältnis
J	Diffusionsstrom
j	Stromdichte
k	Wärmedurchgangskoeffizient
k	kinetische Energie
M	Metall
m	Masse
n	Stoffmenge
p	Druck
q	Wärmestromdichte
S	Quelle oder Senke
T	Temperatur
T	Zeitenverhältnis
t	Zeit



V .....	Volumen
X .....	Hysteresewert

### Strömungsdynamische Modelle

DO-Modell .....	discrete ordinates modell, Wärmestrahlungsmodell
DPM-Modell .....	discrete phase model - Mehrphasenmodell nach dem Euler-Lagrange Ansatz
eularian-Modell ....	Mehrphasenmodell nach dem Euler-Euler Ansatz
k- $\epsilon$ -Modell .....	Zweigleichungs- Turbulenzmodell
mixture-Modell ....	Mehrphasenmodell nach dem Euler-Euler Ansatz
S2S-Modell .....	surface to surface Modell, Wärmestrahlungsmodell
species transport ...	Modell zur Modellierung von Stoffgemische
VOF-Modell .....	volume of fluid - Mehrphasenmodell nach dem Euler-Euler Ansatz

### Physikalische Konstanten

$\sigma$ .....	Stefan-Boltzmann Konstante
F .....	Faradaykonstante
R .....	universelle Gaskonstante

# Abbildungsverzeichnis

1.1 Anforderungen an ein System zur Bordstromversorgung und Themengebiete dieser Arbeit . . . . .	3
2.1 Brennstoffzellenhybridsystem - Dimensionierung von Brennstoffzelle und Batterie	9
2.2 Direkte Verschaltung von einer Brennstoffzelle und Batterie (links) und Verschaltung mittels Leistungselektronik (rechts) . . . . .	10
2.3 Schematischer Aufbau einer Brennstoffzelle (links) [15] und Explosionszeichnung eines HT-PEFC Stacks (rechts) [16] . . . . .	11
2.4 Polarisationskurve einer HT-PEFC [17] Stöchiometrie 2/2 Kühlmittelstrom $1,5 \frac{L}{min}$ Kühlmitteltemperatur 160 °C . . . . .	12
2.5 Ragone Diagramm für Sekundärbatterien nach [23] . . . . .	19
3.1 Reaktoren der Brenngaserzeugung (links: Autothermer Reformer ATR 9.2; Mitte: Wassergasshiftreaktor WGS 4; rechts: Katalytbrenner KB 3) . . . . .	21
3.2 Reaktoren der Brenngaserzeugung: Autothermer Reformer, Katalytbrenner und Wassergasshiftreaktor [25] (von links nach rechts) . . . . .	22
3.3 Iterative Methodik zur vereinfachten 2D Modellierung von Rohrwendel- (links) und Ringspaltwärmetauschern (rechts). [25] . . . . .	24
3.4 Verschaltung des HT-PEFC-Systems im Teststand . . . . .	25
3.5 Verschaltung des Brennstoffzellensystems [26] . . . . .	27
3.6 Jülicher Brenngaserzeugungspackage 2 (links: Foto; Mitte: Gewichts- und Volumenanteile; rechts: Leistungsdichten). Daten aus [26] (10 kW <sub>el</sub> -Leistungsklasse)	29
3.7 Packagekonzept [26] . . . . .	30
3.8 Stromspannungskennlinie nach [36] . . . . .	32
3.9 Verschaltungskonzepte für passive Hybride: Verschaltung mittels Schaltern nach [37] (links), Sauerstoffpartialdruckregelung nach [38] (Mitte) und Diodenkonzept nach [39] (rechts) . . . . .	32
3.10 Strom-Spannungskennlinie für das Konzept nach [39] . . . . .	33
3.11 Verschaltungskonzepte für aktive Hybridsysteme: Entkopplung der Brennstoffzelle (links), des Energiespeichers (Mitte) und der Brennstoffzelle und des Energiespeichers (rechts) . . . . .	34
3.12 Betriebsstrategie basierend auf dem Brennstoffzellenwirkungsgrad: Einteilung der Betriebsmodi nach [41] und [42] . . . . .	36
3.13 Betriebsstrategie mit ladezustandsbasierten Betriebszuständen nach [46] . . . . .	37
3.14 Betriebsstrategie für die Einhaltung eines gewünschten Ladezustands nach [49]	38
3.15 Zylindrisches Brenngaserzeugungspackage für Erdgas [52] . . . . .	43
3.16 Brenngaserzeugungspackage für Diesel [53] . . . . .	44
3.17 Brenngaserzeugungspackage für Benzin [54] . . . . .	45

3.18	Zylindrisches Packagekonzept mit radialer Durchströmung [70] . . . . .	46
3.19	Brenngaserzeugungspackage für Methanol [72] . . . . .	47
3.20	Packagekonzept (links) und Gegenstromwärmeübertrager (rechts) [55] . . . . .	48
3.21	Packagekonzept für ein HT-PEFC-System mit Erdgas als Eduktgas [73] . . . . .	48
4.1	Schematische Darstellung der Methodik der Arbeit . . . . .	51
4.2	Vorbereitung zur Vernetzung: Eingelezene CAD-Geometrie (links), vereinfachte Geometrie (mittig) und Einteilung der Geometrie zur besseren Vernetzung (rechts) . . . . .	57
4.3	Aufbau des dynamischen Systemmodells des Hybridsystems aus einer Batterie und der HT-PEFC-Brennstoffzelle mit Dieselreformierung . . . . .	69
4.4	Aufbau des dynamischen Systemmodells des Hybridsystems aus einer Batterie und der HT-PEFC-Brennstoffzelle mit Dieselreformierung . . . . .	71
4.5	Vergleich zwischen experimentell ermittelter und simulierter Polarisationskurve der HT-PEFC . . . . .	72
5.1	Systemverschaltungskonzept für eine Aufheizung mittels Startbrenner . . . . .	78
5.2	Experimentelle Untersuchung des Startvorgangs des Startbrenners . . . . .	79
5.3	Adiabate Verbrennungstemperatur in Abhängigkeit der Leistung und des Luftvolumenstroms . . . . .	80
5.4	Aufheizkurven bei dem thermischen Startvorgang - Brenngaserzeugungssystem wird zuerst aufgewärmt . . . . .	82
5.5	Aufheizkurven bei dem thermischen Startvorgang - Brennstoffzelle wird zuerst aufgewärmt . . . . .	83
5.6	Fließbild des Systems mit elektrischer Aufheizung . . . . .	84
5.7	Skizze der Verdampfungskammer des ATR 12 . . . . .	85
5.8	Leistungsbedarf für die Verdampfung von Wasser: Konzeptüberprüfung für die elektrische Verdampfung, Teillast 20 % . . . . .	86
5.9	Aufheizkurven bei dem elektrischen Startvorgang - Brenngaserzeugungssystem wird zuerst aufgewärmt . . . . .	88
5.10	Thermische Kopplung des porösen Mediums: Einzonenmodell (links) und Mehrzonenmodell (rechts) . . . . .	90
5.11	Fließbild des Versuchsaufbaus im Teststand . . . . .	92
5.12	Validierung der verwendeten CFD-Modelle für die Modellierung des porösen Mediums . . . . .	93
5.13	Geometrieaufbereitung bei der 2D Simulation . . . . .	94
5.14	Temperaturprofile im Reformer ATR 9.2 während des Aufheizvorgangs . . . . .	96
5.15	Aufheizzeiten der Brenngaserzeugungskomponenten mit verschiedenen Reformergenerationen . . . . .	97
5.16	Temperaturprofile während des Aufheizvorgangs im Reformer ATR 9.2 (oben) und ATR 12 (unten) bei einer Leistung von 2 kW und einer Lufteintrittstemperatur von 600 °C . . . . .	99

5.17	Aufheizzeiten der Brenngaserzeugungskomponenten mit verschiedenen Reformergenerationen bei einer verwendeten Leistung von 2 kW . . . . .	100
5.18	Aufheizdauer der Kernkomponenten der Brenngaserzeugung . . . . .	101
5.19	Temperaturprofile während der Aufheizung des ATR 12 mit einer Leistung von 2 kW . . . . .	102
6.1	Generische Leistungsbedarfsprofile mit variierenden Zeitverhältnissen . . . . .	106
6.2	Hybridisierungsgrad für generische Leistungsbedarfsprofile . . . . .	107
6.3	Leistungsbedarfsprofil einer LKW-Kabine im Sommer [95] . . . . .	109
6.4	Leistungsbedarfsprofil einer LKW-Kabine nach Lutsey [97] . . . . .	110
6.5	Leistungsbedarfsprofil einer LKW-Kabine nach Sorrentino und Pianese [98] . . . . .	111
6.6	Direkte Hybridverschaltung: Auslegung der Brennstoffzelle auf eine Leistung von 2 kW . . . . .	112
6.7	Direkter Hybrid: Leistungsaufteilung zwischen Batterie und Brennstoffzelle: Vergleich zwischen einer (links) und zehn parallelen Batteriezellen (rechts) . . . . .	113
6.8	Direkt Hybrid: Leistungsbereitstellung für die Anwendung als LKW-APU (20 Zellen parallel) . . . . .	114
6.9	Direkter Hybrid: Ladezustand der Batterie (links) und Leistung der Brennstoffzelle (rechts) in Abhängigkeit der Dimensionierung der Batterie . . . . .	115
6.10	Betriebsstrategie BS 1 mit einer konstanten Brennstoffzellenleistung (links) und BS 2 mit zwei Leistungsniveaus (rechts) . . . . .	116
6.11	Betriebsstrategie BS 3 mit einer dynamischen Anpassung des Brenngaserzeugungssystems (links) und BS 4 mit einer zusätzlichen Reduzierung des Wasserstoffnutzungsgrades im tiefen Teillastbereich (rechts) . . . . .	117
6.12	Verlauf des Ladezustands für die verwendeten Betriebsstrategien . . . . .	118
6.13	Wirkungsgrad des Brennstoffzellensystems und des Hybridsystems für die verwendeten Betriebsstrategien . . . . .	119
6.14	Gekoppelte Simulation von Startvorgang und Hybridbetrieb. Links: thermischer Startvorgang, rechts: elektrischer Startvorgang . . . . .	120
6.15	Gekoppelte Simulation von Startvorgang und Hybridbetrieb. Ladezustand der Batterie für verschiedene Startvorgänge . . . . .	121
6.16	Gekoppelte Simulation von Startvorgang und Hybridbetrieb. Einfluss der Betriebsstrategie auf den Ladezustand . . . . .	122
6.17	Simulation des Leistungsbedarfes von einer LKW-Kabine über einen Tag. Links: Betrieb der Brennstoffzelle in der langen Pause, rechts: Betrieb der Brennstoffzelle in allen Pausenzeiten . . . . .	123
6.18	Simulation des Ladezustands bei der Versorgung einer LKW-Kabine . . . . .	124
7.1	Einteilung des Wärmeübertragers in mit der Sweep-Methode vernetzbare Abschnitte (links) und ein mit der Sweep-Methode erzeugtes Rechengitter für einen Abschnitt (rechts) . . . . .	128
7.2	Konforme Grenzflächenvernetzung (links) und Vernetzung mittels eines Interfaces (rechts) . . . . .	129

7.3	Aufgenommene Energie während des Startvorgangs: Konforme Vernetzung (links) und Vernetzung mittels Interfaces (rechts)	130
7.4	Anzahl der Zellen und Rechenzeit mit 16 Prozessoren für die unterschiedlichen Vernetzungsmethoden	131
7.5	Netzstudie: Temperaturprofile im Reformer ATR 9.2 während der Aufheizung für zwei Vernetzungsmethoden	132
7.6	Temperatur- und Druckverteilung während des stationären Betriebs bei Volllast für den Reformer und den Wassergasshiftreaktor in Package 3	133
7.7	Simulierter Temperaturverlauf an den Einbauten des Gegenstromwärmeübertragers (links) und Foto des Wärmeübertragers (rechts)	134
7.8	Simulierter Temperaturverlauf an den Einbauten des Gleichstromwärmeübertragers (links) und Foto des Wärmeübertragers (rechts)	135
7.9	Validierung der simulierten Temperaturen für verschiedene Betriebszustände des Gegenstromwärmeübertragers	136
7.10	Aufheizkurven des Gegenstrom Wärmeübertragers	137
7.11	Kennlinie des Startbrenner-Verdichters und Druckverlustkennlinie des Abgassstrangs	141
7.12	Temperatur- und Druckverteilung im Wärmeübertrager während der Aufheizphase des Systems für eine eingestellte Startbrennerleistung von 6 kW	142
7.13	Austrittstemperaturen der Luft aus dem Wärmeübertrager	143
7.14	Temperaturprofile und Verteilung der Tropfen im Wärmeübertrager für drei unterschiedliche Wassermengen in der Zündphase des Systems für eine eingestellte Startbrennerleistung von 8 kW	144
7.15	Temperaturverläufe und zugegebene Stoffströme bei der Aufheizung des autothermen Reformers ATR 12 mit integrierter elektrischer Beheizung	146
7.16	Temperatur- und Druckverlauf im Wassergasshiftreaktor WGS 6	149
7.17	Kohlenmonoxidkonzentration (links) und eingedüste Wasserpartikel (rechts) im Wassergasshiftreaktor WGS 6	150
8.1	Aufbau des Brenngaserzeugungspackages 5 mit einer Leistungsklasse von 10 kW <sub>el</sub>	157
8.2	Isometrische Ansicht des Brenngaserzeugungspackages 6 (links) und Draufsicht mit der Schnittdarstellung (rechts)	158
8.3	Verläufe der Monolithaustrittstemperaturen während des Aufheizvorgangs im Package 6	159
8.4	Temperaturprofil während des Aufheizvorgangs in den Brenngaserzeugungskomponenten von Package 6	160
A.1	Aufheizung des Jülich IV Stacks	169
A.2	Aufheizung des Reformers: Fehlerabschätzung bei der Position des Thermoelements	172
A.3	Aufheizung des Reformers: Temperaturverlauf der Heizpatrone und simulierter Temperaturverlauf am Eintritt des Reformers	172

---

A.4	Erstellte benutzerdefinierte Funktion (UDF) für die Kopplung des Druckes zwischen zwei 2D-Modellen . . . . .	173
B.1	Offene Zellspannung und Innenwiderstand der SAFT VL7P Batterie . . . . .	175
B.2	Wirkungsgrad der SAFT VL7P Batterie bei einem anfänglichen Ladezustand von 60 % und einer Entladetiefe von 10 % . . . . .	176
C.1	Geschwindigkeitsverteilung im Rohrbündelwärmeübertrager; Vergleich zwischen dem Fall ohne Verteilblech (schwarz) und dem Einbau verschiedener Bleche (rot, blau) . . . . .	177
C.2	Wärmestrom in den Rohren des Rohrbündelwärmeübertragers; Vergleich zwischen dem Fall ohne Verteilblech (schwarz) und dem Einbau eines Bleches (rot) . . . . .	177
C.3	Tropfenverteilung im Wärmeübertrager für einen Luftmassenstrom von 14 kg/h und eine Wassermenge von 30 % der maximalen Wassermenge und Wassertropfengrenzen bei einer Leistung von 6,7 kW des Startbrenners. [100] . . . . .	178
C.4	Ein- und Austrittstemperaturen im Startbrenner-Wärmeübertrager bei einer Startbrennerleistung von 6,7 kW und einem Luftmassenstrom von 14 kg/h [100] . . . . .	179
C.5	Temperaturen und Druckverluste des Mikrostruktur-Wärmeübertragers bei der Durchströmung von Passage 1 mit Reformat . . . . .	181
C.6	Temperaturen und Druckverluste des Mikrostruktur-Wärmeübertragers bei der Durchströmung von Passage 2 mit Reformat . . . . .	182
C.7	Validierung der simulierten Temperaturen für verschiedene Betriebszustände . . . . .	183
C.8	Vergleich der Größe von WGS 4 und WGS 6 . . . . .	184
C.9	Vergleich der Größe von KB 3 und KB 5 . . . . .	185



# Tabellenverzeichnis

5.1	Vergleich der thermischen und elektrischen Aufheizkonzepte . . . . .	89
A.1	Komponenten des Jülich IV HT-PEFC-Stacks . . . . .	170
A.2	Annahmen für die im Brenngaserzeugungssystem ablaufenden Reaktionen . . .	170
A.3	Parameter des Brenngaserzeugungssystems in der 10 $kW_{el}$ -Leistungsklasse [91]	171





# Literaturverzeichnis

- [1] Europäische Kommission. *Fahrplan für den Übergang zu einer wettbewerbsfähigen CO<sub>2</sub>-armen Wirtschaft bis 2050*, 2011. <http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=COM:2011:0112:FIN:de:PDF> , Aufgerufen am 06.02.2015.
- [2] L.-E. Schulte, S. Nentwig, A. Kies, M. Rexeis und S. Hausberger. *Begrenzung der CO<sub>2</sub>-Emissionen aus Nutzfahrzeugen*. <http://www.umweltbundesamt.de/publikationen/begrenzung-der-co2-emissionen-aus-nutzfahrzeugen>, Aufgerufen am 06.02.2015, 2013.
- [3] Annual european union greenhouse gas inventory 1990-2012 and inventory report 2014. [http://unfccc.int/national\\_reports/annex\\_i\\_ghg\\_inventories/national\\_inventories\\_submissions/items/8108.php](http://unfccc.int/national_reports/annex_i_ghg_inventories/national_inventories_submissions/items/8108.php), Aufgerufen am 18.01.2015.
- [4] *Wasserstoff in der Fahrzeugtechnik: Erzeugung, Speicherung, Anwendung*. Helmut Eichlseder, Manfred Klell, 2012. ISBN 9783834817549.
- [5] N. Lutsey, C.J. Brodrick, D. Sperling und C. Oglesby. Heavy-duty truck idling characteristics - Results from a nationwide truck survey. In *Energy and Environmental Concerns 2004*, 2004.
- [6] C.J. Brodrick, T. E. Lipman, M. Farshchi, N. P. Lutsey, H. A. Dwyer, D. Sperling, S.W. Gouse, III, D.B. Harris und F. G. King Jr. Evaluation of fuel cell auxiliary power units for heavy-duty diesel trucks. *Transportation Research Part D: Transport and Environment* 7(4) , 303 – 315, 2002.
- [7] N. Lutsey, J. Wallace, C. J. Brodrick, H. A. Dwyer und D. Sperling. Modeling Stationary Power for Heavy-Duty Trucks: Engine Idling vs. Fuel Cell APUs. *SAE International* 01, 1479, 2004.
- [8] H. Christopher Frey, P.-Y. Kuo und C. Villa. Methodology for characterization of long-haul truck idling activity under real-world conditions. *Transportation Research Part D: Transport and Environment* 13(8) , 516–523, 2008.
- [9] X. Liu, D. Diallo und C. Marchand. Design methodology of hybrid electric vehicle energy sources: Application to fuel cell vehicles. *International Journal of Automotive Technology* 12(3) , 433–441, 2011.
- [10] K. S. Jeong und B. S. Oh. Fuel economy and life-cycle cost analysis of a fuel cell hybrid vehicle. *Journal of Power Sources* 105(1) , 58–65, March 2002.
- [11] J. Wilhelm. Hybridization for fuel cells. In *Fuel Cell Science and Engineering*, ISBN: 9783527330126, pages 1075–1103. Wiley-VCH Verlag, 2012.

- [12] A. Jossen, J. Garche, H. Doering, M. Goetz, W. Knaupp und L. Joerissen. Hybrid systems with lead-acid battery and proton-exchange membrane fuel cell. *Journal of Power Sources* **144**(2) , 395–401, June 2005.
- [13] J.C. Amphlett, R.F. Mann und B.A. Peppley. On board hydrogen purification for steam reformation/ PEM fuel cell vehicle power plants. *International Journal of Hydrogen Energy* **21**(8) , 673–678, August 1996.
- [14] T. R. Ralph und M. P. Hogarth. Catalysis for Low Temperature Fuel Cells, PART II: The anode challenges. *Platinum Metals Rev.*, 2002, **46**, (3), 117, 2002.
- [15] A. Bendzulla. *Von der Komponente zum Stack: Entwicklung und Auslegung von HT-PEFC-Stacks der 5 kW-Klasse*. Dissertation, RWTH Aachen, 2010.
- [16] J. Supra, H. Janßen, W. Lehnert und D. Stolten. Temperature distribution in a liquid-cooled HT-PEFC stack. *International Journal of Hydrogen Energy* **38**(4) , 1943–1951, February 2013.
- [17] L. Lücke, H. Janßen, M. Kvesić, W. Lehnert und D. Stolten. Performance analysis of HT-PEFC stacks. *International Journal of Hydrogen Energy* **37**(11) , 9171–9181, June 2012.
- [18] R. C. Samsun. *Kerosinreformierung für Luftfahrtanwendungen*. Dissertation, RWTH Aachen, 2008.
- [19] Md. F. A. Khan, A. Khan, H. Ibrahim und R. Idem. Kinetic Study of the Catalytic Partial Oxidation of Synthetic Diesel over 5 wt %  $Ni/Ce_{0.5}Zr_{0.33}Ca_{0.085}Y_{0.085}O_{2-\delta}$  Catalyst for Hydrogen Production. *Energy Fuels* **26**(9) , 5421–5429, August 2012.
- [20] A. Jossen und W. Weydanz. *Moderne Akkumulatoren richtig einsetzen*. ISBN: 9783939359111, Reichardt Verlag, 2006.
- [21] D. Pavlov. *Lead-Acid Batteries: Science and Technology*. ISBN: 9780444528827, Elsevier, 2011.
- [22] L.T. Lam und R. Louey. Development of ultra-battery for hybrid-electric vehicle applications. *Journal of Power Sources* **158**(2) , 1140 – 1148, 2006.
- [23] P. Hofmann. *Hybridfahrzeuge*. ISBN: 9783211891919, Springer Verlag, 2010.
- [24] L. Eckstein und B. Gnörich. Design criteria and components for fuel cell powertrain. In *Fuel Cell Science and Engineering*, ISBN: 9783527330126, 1045 - 1074. Wiley-VCH Verlag, 2012.
- [25] Florian Scharf. *Strömungsmechanische Modellierung eines Brenngaserzeugungssystems*. Dissertation, RWTH Aachen, 2012.
- [26] Christiane Wiethage. *Mobile Brenngaserzeugungssysteme mit Mitteldestillaten für Hochtemperatur-PEFC*. Dissertation, RWTH Aachen, 2013.

- 
- [27] J. Pasel, R. C. Samsun, R. Peters und D. Stolten. Fuel Processing of Diesel and Kerosene for Auxiliary Power Unit Applications. *Energy Fuels* **27**(8) , 4386–4394, February 2013.
- [28] J. Pasel, R. C. Samsun, R. Peters, B. Thiele und D. Stolten. Long-term stability at fuel processing of diesel and kerosene. *International Journal of Hydrogen Energy* **39**(31) , 18027–18036, October 2014.
- [29] J. Meißner, J. Pasel, R.C. Samsun, F. Scharf, C. Wiethege und R. Peters. Catalytic burner with internal steam generation for a fuel-cell-based auxiliary power unit for middle distillates. *International Journal of Hydrogen Energy* **39**(8) , 4131–4142, March 2014.
- [30] J. Meißner, J. Pasel, R. C. Samsun, R. Peters und D. Stolten. Start-Up and Load-Change Behavior of a Catalytic Burner for a Fuel-Cell-Based APU for Diesel Fuel. *Fuel Cells* **15** (1), 15 – 26, 2015.
- [31] Z. Porš. *Eduktvorbereitung und Gemischbildung in Reaktionsapparaten zur autothermen Reformierung von dieselähnlichen Kraftstoffen*. Dissertation, RWTH Aachen, 2005.
- [32] Z. Porš. Vorrichtung zur Herstellung eines Kraftstoff-Oxidationsmittel-Gemisches, Patent DE 102006024038, 2007.
- [33] R. C. Samsun, J. Pasel, J. Meißner, H. Janßen, W. Lehnert und R. Peters. Operational Experience from a 5 kW<sub>e</sub> HT-PEFC System with Reforming of Diesel and Kerosene. *ECS Transactions* **58** (1), 165 – 174, 2013.
- [34] R. C. Samsun, J. Pasel, H. Janßen, W. Lehnert, R. Peters und D. Stolten. Design and test of a 5 kW<sub>e</sub> high-temperature polymer electrolyte fuel cell system operated with diesel and kerosene. *Applied Energy* **114**(0) , 238–249, February 2014.
- [35] L. Lücke. *Entwicklung und Analyse von kompakten Brenngaserzeugungssystemen für Brennstoffzellen*. Diplomarbeit, RWTH Aachen, 2009.
- [36] M.J Blackwelder und R.A Dougal. Power coordination in a fuel cell-battery hybrid power source using commercial power controller circuits. *Journal of Power Sources* **134**(1) , 139–147, July 2004.
- [37] S. J. Andreasen, L. Ashworth, I. N. Menón Remón und S. K. Kær. Directly connected series coupled HTPEM fuel cell stacks to a Li-ion battery DC bus for a fuel cell electrical vehicle. *International Journal of Hydrogen Energy* **33**(23) , 7137–7145, December 2008.
- [38] J. Bernard, M. Hofer, U. Hannesen, A. Toth, A. Tsukada, F. N. Büchi und P. Dietrich. Fuel cell/battery passive hybrid power source for electric powertrains. *Journal of Power Sources* **196**(14) , 5867–5872, July 2011.
- [39] A. Nishizawa, J. Kallo, O. Garrot und J. Weiss-Ungethüm. Fuel cell and Li-ion battery direct hybridization system for aircraft applications. *Journal of Power Sources* **222**, 294–300, January 2013.
- [40] Duo Xiao und Qiuting Wang. The Research of Energy Management Strategy for Fuel Cell Hybrid Vehicle. In *2012 International Conference on Industrial Control and Electronics*

- Engineering (ICICEE)*, pages 931–934. IEEE COMPUTER SOC, 2012. Engineering (ICICEE), Xian, PEOPLES R CHINA, AUG 23-25, 2012.
- [41] C.H. Zheng, C.E. Oh, Y.I. Park und S.W. Cha. Fuel economy evaluation of fuel cell hybrid vehicles based on equivalent fuel consumption. *International Journal of Hydrogen Energy* **37**(2) , 1790–1796, January 2012.
  - [42] C. H. Zheng. Fuel consumption of fuel cell hybrid vehicles considering battery SOC differences. *International Journal of Automotive Technology* **13**(6) , 979–985, 2012.
  - [43] D.J. Xuan, J.W. Kim und Y.B. Kim. Optimal operation strategy development for fuel cell hybrid vehicle. **25**(1) , 183–192–, 2011.
  - [44] R. Chandrasekaran, W. Bi und T. F. Fuller. Robust design of battery/fuel cell hybrid systems - Methodology for surrogate models of Pt stability and mitigation through system controls. *Journal of Power Sources* **182**(2) , 546–557, August 2008.
  - [45] P. García, J.P. Torreglosa, L.M. Fernández und F. Jurado. Viability study of a FC-battery - SC tramway controlled by equivalent consumption minimization strategy. *International Journal of Hydrogen Energy* **37**(11) , 9368–9382, June 2012.
  - [46] K. Ettihir, L. Boulon, K. Agbossou, S. Kelouwani und M. Hammoudi. Design of an Energy Management Strategy for PEM Fuel Cell Vehicles. In *2012 IEEE International Symposium on Industrial Electronics (ISIE)*, pages 1714–1719. Hangzhou, China, 28-31 Mai, 2012.
  - [47] Z. Jiang, L. Gao, M. J. Blackwelder und R. A. Dougal. Design and experimental tests of control strategies for active hybrid fuel cell/battery power sources. *Journal of Power Sources* **130**(1-2) , 163–171, May 2004.
  - [48] Z. Zhang, W.-J. Lee und M. Liu. PEM fuel cell and battery hybrid power supply system design based on fuel flow rate control. In *Electric Utility Deregulation and Restructuring and Power Technologies (DRPT), 2011 4th International Conference on*, pages 284–291, 2011.
  - [49] M. Ouyang, L. Xu, J. Li, L. Lu, D. Gao und Q. Xie. Performance comparison of two fuel cell hybrid buses with different powertrain and energy management strategies. *Journal of Power Sources* **163**(1) , 467–479, December 2006.
  - [50] Katsuyuki Sato, Toshiaki Yachi, Akira Takeuchi und Tadatoshi Babasaki. Battery Management for Fuel Cell/Battery Hybrid Power Supply System. In *2011 IEEE 33rd International Telecommunications Energy Conference (INTELEC)*. (INTELEC), Amsterdam, NETHERLANDS, OCT 09-13, 2011.
  - [51] E. Schaltz, A. Khaligh und P.O. Rasmussen. Influence of Battery/Ultracapacitor Energy-Storage Sizing on Battery Lifetime in a Fuel Cell Hybrid Electric Vehicle. *Vehicular Technology, IEEE Transactions on* **58**(8) , 3882–3891, 2009.

- [52] Sheldon H.D. Lee, Daniel V. Applegate, Shabbir Ahmed, Steven G. Calderone und Todd L. Harvey. Hydrogen from natural gas: part I-autothermal reforming in an integrated fuel processor. *International Journal of Hydrogen Energy* **30**(8) , 829–842, July 2005.
- [53] S. Yoon, S. Lee und J. Bae. Development of a self-sustaining kW<sub>e</sub>-class integrated diesel fuel processing system for solid oxide fuel cells. *International Journal of Hydrogen Energy* **36**(16) , 10302–10310, August 2011.
- [54] A. Qi, S. Wang, G. Fu und D. Wu. Integrated fuel processor built on autothermal reforming of gasoline: A proof-of-principle study. *Journal of Power Sources* **162**(2) , 1254–1264, November 2006.
- [55] C. Severin, S. Pischinger und J. Ogrzewalla. Compact gasoline fuel processor for passenger vehicle APU. *Journal of Power Sources* **145**(2) , 675–682, 2005.
- [56] S. Springmann, M. Bohnet, A. Docter, A. Lamm und G. Eigenberger. Cold start simulations of a gasoline based fuel processor for mobile fuel cell applications. *Journal of Power Sources* **128**(1) , 13–24, 2004.
- [57] J.-Y. Kim, Z. Park und I.-H. Son. Burner assembly for a reformer of a fuel cell system, Patent EP 1679758, 2006.
- [58] S.C.L.I.P.T. Lee, L.L.I.P.T. Gorobinskiy, J.G.L.I.P.T. Ahn, J.K.L.I.P.T. Kim, D.M.L.I.P.T. Suh, C.H.L.I.P.T. Lee und J.Y.L.I.P.T. Kim. Fuel reforming apparatus heated by a burner, Patent EP 1767265, 2007.
- [59] Y. Liu, C. L. Krause und K. H. Nguyen. Hybrid combustor for fuel processing applications, Patent US 7578669, 2009.
- [60] M. Boltze, M. Rozumek, S. Käding, M. Pfalzgraf, A. Engl, B. Bleeker, M. Süßl, M. Bedenbecker, J. Baade, J. Lawrence und G/ünter N. Verwendung einer Brennvorrichtung in einem Brennstoffzellensystem, Patent EP 1923946, 2008.
- [61] M. Iio. Fuel cell power plant warm up, Patent US 0227129, 2005.
- [62] J. L. Zhao, W. F. Northrop, T. Bosco, V. Rizzo und C. Kim. Startup burner, Patent WO 13125 a2, 2005.
- [63] S. Lee, W. R. Schwartz, J.-R. Choi, J.-G. Ahn, D.-H. Kim, I.-H. Son, W. C. Shin und J.-Y. Kim. Start-up characteristics of commercial propane steam reformer for 200 W<sub>e</sub> portable fuel cell system. *International Journal of Hydrogen Energy* **35**(22) , 12286–12294, November 2010.
- [64] S. G. Goebel, W. H. Pettit, M. EH. Sennoun und D. P. Miller. Staged lean combustion for rapid start of a fuel processor, Patent US 6926748, 2005.
- [65] S. G. Goebel. Direct water vaporization for fuel processor startup and transients, Patent US 7008707, 2006.

- [66] G. M. Robb und W. H. Pettit. Method for quick start-up of a fuel processing system using controlled staged oxidation, Patent US 6846585, 2005.
- [67] B. J. Bowers, J. L. Zhao, M. Ruffo, R. Khan, D. Dattatraya, N. Dushman, J.-C. Beziat und F. Boudjemaa. Onboard fuel processor for PEM fuel cell vehicles. *International Journal of Hydrogen Energy* 32(10-11) , 1437–1442, July 2007.
- [68] N. Zartenar und U. Martin. Vorwärmer für eine Brennstoffzelle, Patent EP 1693916, 2006.
- [69] S. Roychoudhury. Recent fuel processor development at PCI. In *Präsentation beim "10th Annual SECA Workshop"*, 2009.
- [70] J.M. Bentley, W.L. Mitchell, L.G. Clawson und J.C. Cross. Reactor for producing hydrogen from hydrocarbon fuels , Patent US 6783742b2, 2004.
- [71] E. Ramschak. SOFC APU Entwicklung der AVL. In *Präsentation beim "Workshop Brennstoffzellen" der Austrian Energy Agency*, 2008.
- [72] R. Isogawa. Fuel reformer for mounting on a vehicle, Patent US 6390030, 2002.
- [73] J. Ogrzewalla und C. Bollig. *Bordstromversorgung für gasbetriebene Fahrzeuge auf Basis einer PEM Brennstoffzelle: Abschlussbericht zum Verbundvorhaben*. FEV Motorentechnik GmbH, 2010.
- [74] O Connell M., Kolb G., Pennemann H., Zapf R. und Hessel V. Systemic aspects of micro-process engineering. Illustrated by selected examples from fuel processing for fuel cells. *Chimica Oggi-Chemistry Today*, 28 (4), 5–7, 2010.
- [75] J. Rechberger, M. Reissig und M. Hauth. AVL SOFC Systems on the Way of Industrialization. *ECS Trans.* 57, 141 – 148, 2013.
- [76] Verein Deutscher Ingenieure VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen (GVC), Herausgeber. *VDI-Wärmeatlas*. ISBN: 9783540255048, 2006.
- [77] *Ansys Inc., Ansys Fluent 14.0 Theory Guide*.
- [78] *Ansys Inc. Unterlagen zum Kurs: Geometrie & Vernetzung*.
- [79] Website NGK Automotive Ceramics U.S.A. Inc. [http://www.ngk-detroit.com/prod\\_ceramsubstrates\\_passcars.html](http://www.ngk-detroit.com/prod_ceramsubstrates_passcars.html), Aufgerufen am 18.01.2015.
- [80] M. H. Yousuf. Development of Pressure Swirl Atomizer for the Fuel Processor of a Fuel Cell System. *Masterarbeit, FH Aachen*, 2014.
- [81] C. Krupp. *Hybridisierung von HT-PEFC-Systemen mit Brenngaserzeugung zur Bordstromversorgung*. Diplomarbeit, RWTH Aachen, 2012.
- [82] J. Larminie. *Fuel Cell Systems Explained*. ISBN 047084857X 9780470848579, 2003.

- [83] C.-H. Chao und T.-C. Jen. Transient behavior experiments for hybrid fuel cell-battery systems. In *2012 International Symposium on Information Technology in Medicine and Education (ITME)*, 2 , 985 - 990, 2012.
- [84] L. Barelli, G. Bidini und A. Ottaviano. Optimization of a PEMFC/battery pack power system for a bus application. *Applied Energy* **97**, 777–784, 2012.
- [85] A. W. Al-Dabbagh, L. Lu und A. Mazza. Modelling, simulation and control of a proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) power system. *International Journal of Hydrogen Energy* **35**(10) , 5061–5069, May 2010.
- [86] O. Sundstrom und A. Stefanopoulou. Optimum battery size for fuel cell hybrid electric Vehicle- part I. *Journal of Fuel Cell Science and Technology* **4**(2) , 167–175, May 2007.
- [87] J. Lopes, J. A. Pomilio und P. A. V. Ferreira. Optimal Sizing of Batteries and Ultra-capacitors for Fuel Cell Electric Vehicles. In *IECON 2011: 37th annual Conference on IEEE Industrial Electronics Society*, 2011.
- [88] M. Einhorn, V. Conte, C. Kral und J. Fleig. Comparison of electrical battery models using a numerically optimized parameterization method. In *2011 IEEE Vehicle Power and Propulsion Conference, VPPC 2011*, 2011.
- [89] M. Einhorn, F.V. Conte, C. Kral und J. Fleig. Comparison, selection, and parameterization of electrical battery models for automotive applications. *IEEE Transactions on Power Electronics* **28**(3) , 1429–1437, 2013.
- [90] J. Wilhelm. *Hybridisierung und Regelung eines mobilen Direktmethanol-Brennstoffzellen-Systems*. Dissertation, RWTH Aachen, 2011.
- [91] Paul Weinhard. Model for the transient start-up behavior of a 5 kW HT-PEFC system with fuel reforming. *Masterarbeit, FH Aachen*, 2014.
- [92] M. W. Rohsenow, J.P. Hartnett und Y.I. Cho. *Handbook of heat transfer*. ISBN: 9780070535558, McGraw-Hill,, 1998.
- [93] A. Schlegel, P. Benz und S. Buser. Wärmeübertragung und Druckabfall in keramischen Schaumstrukturen bei erzwungener Strömung. *Wärme - und Stoffübertragung* **28**(5) , 259–266, 1993.
- [94] Q. Cai, D.J.L. Brett, D. Browning und N.P. Brandon. A sizing-design methodology for hybrid fuel cell power systems and its application to an unmanned underwater vehicle. *Journal of Power Sources* **195**(19) , 6559–6569, October 2010.
- [95] C. Krupp, R.C. Samsun, R. Peters, D. Stolten, B. Gnorich und S. Baltzer. Fuel cell - battery hybrid systems for auxiliary power units. In *Renewable Energy Research and Application (ICRERA), 2014 International Conference on*, pages 480–484, 2014.
- [96] T. Grube, R. Menzer, R. C. Samsun, J. Pasel und R. Peters. Optionen und Herausforderungen des Einsatzes von Auxiliary Power Units an mobilen Anwendungen. In *Innovative*



- Fahrzeugantriebe - Innovative Power Train Systems, Dresden, 9./10.11.2006. - Düsseldorf, VDI, 2006. - (VDI-Berichte ; 1975). - 3-18-091975-2. - S. 499 - 528, 2006.*
- [97] N. Lutsey. Fuel Cell for Auxiliary Power in Trucks: Requirements, Benefits, and Marketability. *Master Thesis, University of California*, 2003.
- [98] M. Sorrentino und C. Pianese. Control Oriented Modeling of Solid Oxide Fuel Cell Auxiliary Power Unit for Transportation Applications. *Journal of Fuel Cell Science and Technology* **6**(4) , 041011, 2009.
- [99] Datenblatt der Batterie SAFT VL7P. <http://www.houseofbatteries.com/documents/VL7P.pdf>, Aufgerufen am 18.01.2015.
- [100] Lars Bergholz. Entwicklung und Simulation eines maßgeschneiderten Wärmeübertragers für Brennstoffzellensysteme. *Studienarbeit, TU Kaiserslautern*, 2014.
- [101] Air Squared. Scroll compressor P16H30N3.25R. <http://airsquared.com/products/compressors/p16h30n325r>, Aufgerufen am 06.02.2015, 2014.

# Danksagung

Die vorliegende Dissertation ist während meiner Tätigkeit am Institut für Energie- und Klimaforschung – Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-3) der Forschungszentrum Jülich GmbH entstanden.

Ich danke meinem Doktorvater und Direktor des IEK-3, Herrn Prof. Dr.-Ing. Detlef Stolten für die Ermöglichung und die Förderung meiner Arbeit. Herrn Prof. Dr.-Ing. Lutz Eckstein und Herrn Prof. Dr.-Ing. Reinhold Kneer von der RWTH Aachen danke ich für die Übernahme des Korreferats beziehungsweise des Prüfungsvorsitzes.

Großer Dank gebührt meinem Abteilungsleiter Prof. Dr.-Ing. Ralf Peters und meinem Gruppenleiter Dr.-Ing. Remzi Can Samsun. Sie waren in Fragen fachlicher, methodischer und administrativer Art immer ansprechbar und standen mir mit konstruktiven Lösungsvorschlägen zur Seite. Ihre Erfahrung und stete Unterstützung haben wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Die freundliche und hilfsbereite Arbeitsatmosphäre am IEK-3 im Allgemeinen sowie der Abteilung BGS im Besonderen hat mich immer wieder neu inspiriert und motiviert. Ich danke allen, die dazu beigetragen und mich unterstützt haben. Mein Dank gebührt insbesondere Herrn Andreas Tschauder, Herrn Jan Meißner und Herrn Uwe Klüttgen für die hervorragende Zusammenarbeit bei der Konstruktion und der Auslegung der Reaktoren und Packages, sowie Dr. Joachim Pasel, Dirk Schmidt, Matthias Prawitz, Bert Sobotta, Lydia Lang, Jonas Lefers und Bernd Pelzer für die Unterstützung bei der technischen Ausführung der durchgeführten Experimente. Den Kollegen der Abteilung SOFC, Prof. Ludger Blum, Roland Peters, Robert Deja, Wilfried Tiedemann, Stefan Küpper und Rabah Lehekal, danke ich für die Unterstützung bei der Durchführung der Experimente im Bereich der Wärmeübertrager.

Ich danke allen Doktoranden des IEK-3 für die gegenseitige Unterstützung und die angenehme Atmosphäre. Besonders hilfreich waren die Diskussionen mit Dr. Sebastian Luhr im Bereich der Strömungssimulationen und mit Dr. Klaus Wedlich und Dr. Timm Bergholz im Bereich der Lithium-Ionen Batterien. Ebenso danke ich den Kooperationspartnern Sydney Baltzer und Dr.-Ing. Bruno Gnörich des Instituts für Kraftfahrzeuge (ika) der RWTH Aachen und weiterhin danke ich den beteiligten Praktikanten und Studien- und Masterarbeitern Sebastian Pinson, Paul Weinhard, Hasnain Muhammad Yousuf und Lars Bergholz für ihre Beiträge zu dieser Arbeit.

Mein größter Dank gebührt meiner Freundin Jacqueline Mandelartz, meinen Schwestern Julia und Nina Krupp und meinen Eltern Alfons und Ulrike Krupp, die mich auf meinem Weg begleitet und unterstützt haben.



Band / Volume 296

**Influence of Impurities on the Fuel Retention in Fusion Reactors**

M. Reinhart (2015), 140 pp

ISBN: 978-3-95806-105-7

Band / Volume 297

**The role of abiotic processes in the formation and degradation of gaseous nitrogen compounds in the soil**

J. Heil (2015), XIV, 106 pp

ISBN: 978-3-95806-106-4

Band / Volume 298

**12th Carolus Magnus Summer School on Plasma and Fusion Energy Physics**

edited by Kristel Crombé (2015), 468 pp

ISBN: 978-3-95806-107-1

Band / Volume 299

**Optical near-field investigations of photonic structures for application in silicon-based thin-film solar cells**

A. M. Ermes (2015), vi, 157 pp

ISBN: 978-3-95806-108-8

Band / Volume 300

**Strom- und Gasmärktedesign zur Versorgung des deutschen Straßenverkehrs mit Wasserstoff**

M. Robinius (2015), VI, 255 pp

ISBN: 978-3-95806-110-1

Band / Volume 301

**Alterung von Vakuum-plasmagespritzten MCrAlY-Schutzschichten und ihre Wechselwirkung mit Nickel- und Cobalt-basierten  $\gamma/\gamma'$ -Superlegierungen**

P. J. Terberger (2015), IX, 149 pp

ISBN: 978-3-95806-113-2

Band / Volume 302

**Verbundvorhaben ELFA Effiziente Luftfahrzeuge**

Brennstoffzellensysteme zur Energieerzeugung BREZEN –

Teilprojekt: Kerosinaufbereitung

R. Peters, J. Meißner, J. Pasel, R. C. Samsun, D. Stolten (2016), viii, 84 pp

ISBN: 978-3-95806-114-9

Band / Volume 303

**Cavity-Ringdown-Spektroskopie zur Untersuchung der Rolle höherer Stickoxide für den nächtlichen Schadstoffabbau in der unteren Atmosphäre**

S. Schrade (2016), II, 118 pp

ISBN: 978-3-95806-116-3

Band / Volume 304

**Thermo-mechanical Properties of Mixed Ionic-Electronic Conducting Membranes for Gas Separation**

V. K. Stournari (2016), 167 pp

ISBN: 978-3-95806-117-0

Band / Volume 305

**Untersuchungen zu suspensionsplasmagespritzten Wärmedämmschichtsystemen**

N. Schlegel (2016), X, 136 pp

ISBN: 978-3-95806-118-7

Band / Volume 306

**Laser processing for the integrated series connection of thin-film silicon solar cells**

B. Turan (2016), XII, 190 pp

ISBN: 978-3-95806-119-4

Band / Volume 307

**Development and Application of a Multiscale Model for the magnetic Fusion Edge Plasma Region**

F. Hasenbeck (2016), 190 pp

ISBN: 978-3-95806-120-0

Band / Volume 308

**Emissions of Biogenic Volatile Organic Compounds and Ozone Balance under Future Climate Conditions**

C. Wu (2016), VI, 105 pp

ISBN: 978-3-95806-121-7

Band / Volume 309

**Computerunterstützte Auslegung eines Brennstoffzellen-Batterie-Hybridsystems für die Bordstromversorgung**

C. Krupp (2016), iii, 207 pp

ISBN: 978-3-95806-124-8



**Energie & Umwelt /  
Energy & Environment  
Band / Volume 309  
ISBN 978-3-95806-124-8**

